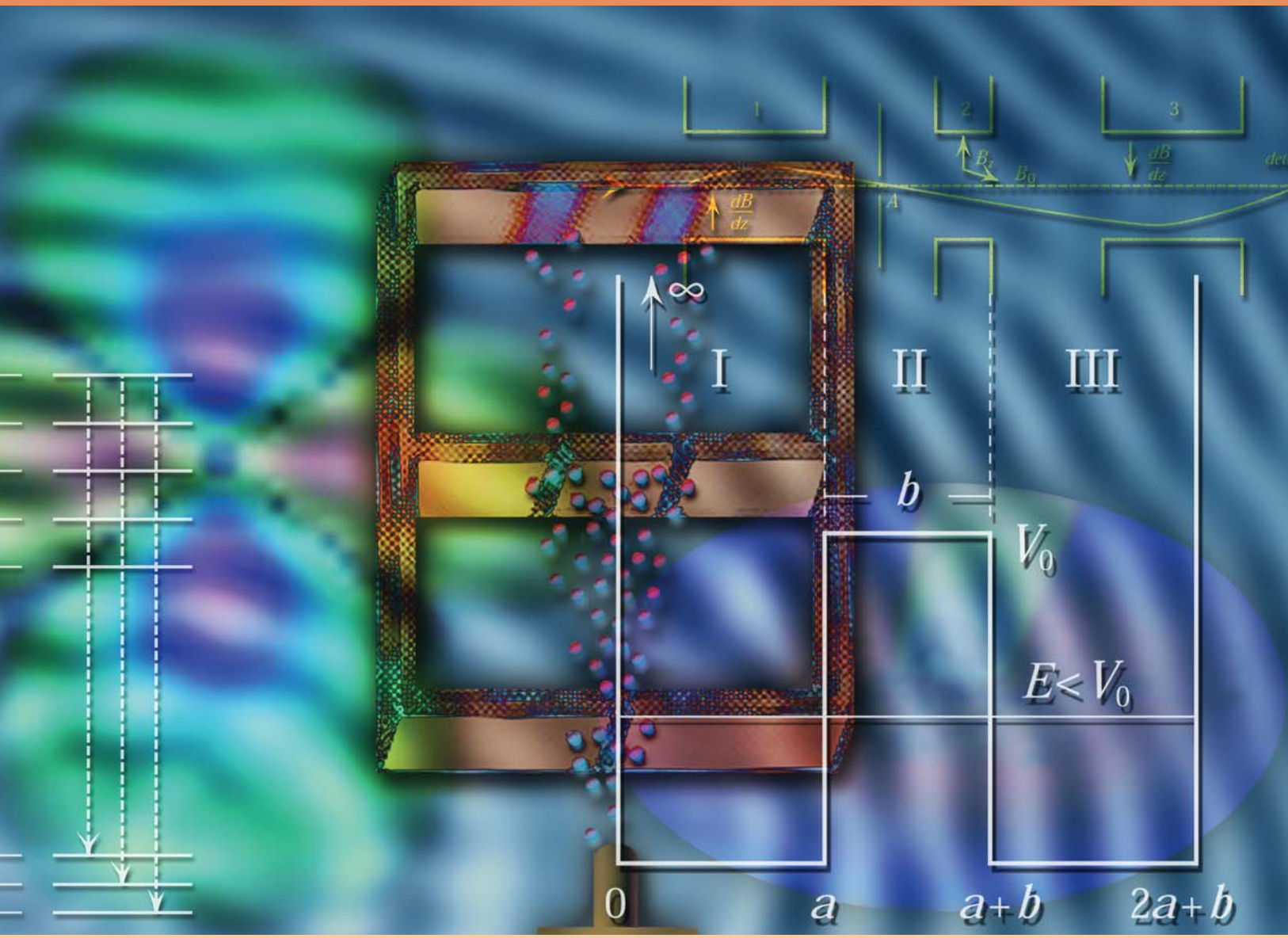
Luis de la Peña • Mirna Villavicencio

PROBLEMAS Y EJERCICIOS DE MECÁNICA CUÁNTICA



EDICIONES CIENTÍFICAS UNIVERSITARIAS
TEXTO CIENTÍFICO UNIVERSITARIO

EDICIONES CIENTÍFICAS UNIVERSITARIAS

Serie Texto Científico Universitario

Problemas y ejercicios de mecánica cuántica

Luis de la Peña realizó sus estudios de ingeniero en comunicaciones y electrónica en la Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica (esime) del Instituto Politécnico Nacional, y el doctorado en ciencias físico-matemáticas en la Universidad Estatal Lomonosov de Moscú. Desde 1958 labora en el Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México (unam), del cual es investigador emérito. En 1984 se le otorgó la Medalla Académica de la Sociedad Mexicana de Física, en 1989 el Premio Universidad Nacional (en Investigación en Ciencias Exactas) y en 2002 el Premio Nacional de Ciencias y Artes en el área de Ciencias Físico-Matemáticas y Naturales.

Mirna Villavicencio realizó sus estudios de licenciatura y maestría en la Facultad de Ciencias de la unam. Desde 1993 es profesora asociada del Departamento de Física de la Facultad de Ciencias de la unam.

LUIS DE LA PEÑA • MIRNA VILLAVICENCIO

PROBLEMAS Y EJERCICIOS DE MECÁNICA CUÁNTICA

Universidad Nacional Autónoma de México
Fondo de Cultura Económica
méxico

Primera edición, 2003

Peña, Luis de la, y Mirna Villavicencio
Problemas y ejercicios de mecánica cuántica / Luis de la Peña y Mirna Villavicencio — México : FCE, UNAM, 2003
xxxii, 815 p. ; 28 × 21 cm — (Colec. Sección de Obras de Ciencia y Tecnología)
Texto para nivel licenciatura, maestría y doctorado

ISBN 968-16-7035-3

1. Física — Mecánica cuántica I. Villavicencio, Mirna coaut. II. Ser III. t

LC QC 174.12 P46 Dewey 530.12 P562p

Se prohíbe la reproducción total o parcial de esta obra
—incluido el diseño tipográfico y de portada—,
sea cual fuere el medio, electrónico o mecánico,
sin el consentimiento por escrito del editor

Agradecemos sus comentarios y sugerencias al correo electrónico
laciencia@fce.com.mx

Conozca nuestro catálogo en
http://www.fondodeculturaeconomica.com

D. R. © 2003, Universidad Nacional Autónoma de México
Edificio de la Coordinación Científica, circuito exterior
Ciudad Universitaria, México, D.F.
http://www.unam.mx

D. R. © 2003, Fondo de Cultura Económica
Carretera Picacho-Ajusco, 227; 14200 México, D. F.

ISBN 968-16-7035-3

Impreso en México • *Printed in Mexico*

Índice general

Índice de figuras xxix

Prefacio xxxi

I. La mecánica cuántica primitiva 1

I.1. Problemas del texto 1

I.1. Límites de la distribución de Planck 1

I.2. Ley de Stefan-Boltzmann 2

I.3. Ley de desplazamiento de Wien 3

I.4. Frecuencia de corte para los osciladores de Planck 5

I.5. Radiación cósmica de fondo 6

I.6. Energía de un cuanto de luz visible 7

I.7. Función de trabajo del potasio 7

I.8. Pérdida máxima de energía del fotón en el efecto Compton 8

I.9. Dispersión Compton 9

I.10. Energía de retroceso de un núcleo que emite un fotón 12

I.11. Dispersión y absorción de fotones por cargas libres 12

I.12. Potencia radiada en una órbita circular de Bohr . 13

I.13. Orbitas elípticas en el modelo de Bohr 14

I.14. Cuantización de Wilson-Sommerfeld para potencial proporcional a r^k 16

I.15. Cuantización de Wilson-Sommerfeld para potencial proporcional a $1/r^{3/2}$ 18

I.2. Problemas adicionales 18

I.16. Energía emitida por un cuerpo negro 18

I.17. Efecto fotoeléctrico en aluminio 18

I.18. Retrodispersión de rayos X en el efecto Compton 19

I.19. Un ejemplo de aplicación del principio de correspondencia 20

I.20. Cuantización de Wilson-Sommerfeld para un potencial gravitatorio 21

*I.21. Fluctuaciones de la energía de un campo de radiación en equilibrio 21

I.3. Ejercicios 23

II. Propiedades estadísticas y ondulatorias del movimiento de partículas **25**
II.1. Problemas del texto 25
II.1. Comparación de longitudes de onda de de Broglie 25
II.2. Longitud de onda de de Broglie y masa 26
II.3. Modelo de Bohr y longitud de onda de de Broglie 26
II.4. Radio de la primera órbita de Bohr y longitud de onda de luz visible 28
II.5. Combinación de dos distribuciones normales . . . 28
II.6. Propiedades de una distribución gaussiana 31
II.2. Problemas adicionales 33
II.7. Longitud de onda de de Broglie de electrones relativistas 33
II.8. Masa relativista del electrón y masa efectiva del fotón 34
II.9. Longitud de onda de de Broglie en términos de la energía cinética 34
II.10. Potencial cuadrado unidimensional y relación de de Broglie 35
II.11. Difracción de Bragg de primer orden 35
II.12. Presión de radiación 36
II.3. Ejercicios 36

III. Ecuación estacionaria de Schrödinger **39**
III.1. Problemas del texto 39
III.1. Coeficientes de Fourier 39
III.2. Transformada integral de Fourier de diversas funciones 40
III.3. Solución de algunos problemas de valores propios 42
*III.4. Densidad triangular de electrones en un pozo de potencial unidimensional 44
III.5. Método de normalización de Gram-Schmidt . . . 46
III.6. Valor medio de x y de x^2 en una caja de potencial unidimensional 48
III.2. Problemas adicionales 50
III.7. Eigenfunciones para un pozo cuadrado infinito y operador de momento 50
III.8. Evolución de la función de onda para partículas en un pozo de potencial infinito 50
III.9. Mínima desviación cuadrática media de la posición 51
III.3. Ejercicios 51

IV. La partícula libre **53**
IV.1. Problemas del texto 53
IV.1. Propiedades de la función delta de Dirac 53
IV.2. Una representación integral de la función delta de Dirac 56
IV.3. Relación entre la distibución normal y la función delta de Dirac 56
IV.4. Función delta de Dirac y variables ignorables . . . 57

IV.5. Función delta de Dirac en coordenadas polares . . 58
IV.6. Función delta de Dirac en coordenadas esféricas . 59
IV.7. Indefinición del origen del potencial en la ecuación estacionaria de Schrödinger 60
IV.8. Posición y velocidad medias para un paquete de partículas libres 60
IV.2. Problemas adicionales 63
IV.9. Transformada de Fourier de la función de onda de partículas libres 63
IV.10. Evolución de un paquete de partículas libres . . . 63
*IV.11. Propagación sin distorsión de un paquete de partículas libres 65
IV.12. Velocidad de fase asociada a una onda de de Broglie 66
IV.13. Velocidad de fase y velocidad de grupo de ondas en agua 66
IV.3. Ejercicios 68

V. Ecuación completa de Schrödinger 71
V.1. Problemas del texto 71
V.1. Generalización de la ecuación de continuidad cuántica 71
V.2. Propiedades de continuidad de la derivada de la función de onda 71
V.3. Propagador de la ecuación de Schrödinger 72
V.4. Propiedades integrales del propagador 74
V.5. Densidad de flujo en un pozo rectangular infinito 75
V.6. Fase de la función de onda como potencial de velocidad 75
V.7. Análisis de un estado no estacionario 76
V.8. Evolución de un paquete bajo la acción de un campo constante 78
V.9. Evolución de un paquete inicialmente uniforme . . 79
V.10. Evolución de un paquete inicialmente gaussiano . 79
V.2. Problemas adicionales 81
V.11. Evolución de un paquete inicialmente gaussiano. Límite clásico 81
V.12. Evolución de una función de onda para un pozo rectangular infinito 83
V.13. Cuantización de Schrödinger para un potencial gravitatorio 84
V.14. Ecuación de Schrödinger y transfomaciones de Galileo 85
V.15. Relación de de Broglie y relatividad galileana . . 87
V.16. Conexión con la interpretación de Bohm de la mecánica cuántica 88
V.17. Límite no relativista de la ecuación de Klein-Gordon para partícula libre 91
V.3. Ejercicios 92

VI. Barreras y pozos unidimensionales **95**
VI.1. Problemas del texto 95
VI.1. Número de estados ligados en un pozo cuadrado unidimensional 95
VI.2. Pozo de potencial simétrico. Número de estados ligados 96
VI.3. Potencial atractivo delta de Dirac 97
VI.4. Coeficientes de transmisión y reflexión para un pozo rectangular finito 99
VI.5. Coeficientes de transmisión y reflexión para una barrera de potencial 101
VI.6. Primeros estados de un pozo doble simétrico rectangular 102
VI.7. Coeficientes de transmisión y reflexión para el pozo del problema anterior 106
VI.8. Pozo de potencial tridimensional rectangular finito 106
VI.9. Propiedades de la matriz S para potenciales unidimensionales 108
VI.10. Matriz S para un pozo rectangular unidimensional 110
VI.11. Pozo rectangular finito con barrera infinita 112
VI.12. Coeficientes de transmisión y reflexión e inversión temporal 114
VI.2. Problemas adicionales 114
VI.13. Forma de las resonancias para la barrera rectangular 114
*VI.14. Fuerza media sobre las paredes de un pozo cuadrado infinito 115
VI.15. Coeficientes de transmisión y reflexión para una barrera delta de Dirac 116
VI.16. Potencial modelado por dos funciones delta de Dirac 117
VI.17. Valor medio de la posición a tiempo arbitrario en un pozo cuadrado infinito 118
VI.18. Tiempo medio de cruce en una barrera de potencial 119
VI.19. Velocidad de flujo en presencia de una barrera . . 121
VI.20. Incidencia oblícua de partículas sobre un escalón de potencial 124
VI.3. Ejercicios 126

VII. Métodos aproximados I: método WKB, teoría y aplicaciones. **129**
VII.1. Problemas del texto 129
VII.1. Coeficiente de transmisión para una barrera rectangular 129
VII.2. Estados ligados para un potencial lineal unidimensional 130
VII.3. Método WKB y potencial de Hylleraas. Coeficiciente de transmisión 132
VII.4. Método WKB y condiciones de cuantización con barrera infinita 133
VII.5. Método WKB y condiciones de cuantización para un potencial gravitatorio 134

VII.6. Método WKB para el pozo rectangular infinito . . 135
VII.2. Problemas adicionales 136
VII.7. Solución de ecuaciones diferenciales utilizando el método WKB 136
VII.8. Método WKB aplicado a un potencial proporcional a x^4 137
VII.9. Número de niveles discretos de energía en un potencial atractivo general 137
VII.10. Coeficiente de transmisión para una barrera de Hylleraas 138
VII.11. Efecto túnel macroscópico 138
*VII.12. Estructura del espectro de problemas unidimensionales y método WKB 139
*VII.13. Funciones propias del pozo de potencial cilíndrico 140
VII.14. Método WKB y vida media en un pozo de potencial esférico 143
VII.3. Ejercicios 144

VIII. Operadores y variables dinámicas 145
VIII.1. Problemas del texto 145
VIII.1. Separación de un operador unitario 145
VIII.2. Operadores unitarios en términos de operadores hermitianos 146
VIII.3. Combinaciones hermitianas de dos operadores hermitianos 146
VIII.4. Hermiticidad del hamiltoniano de Schrödinger . . 147
VIII.5. Propiedades del conmutador. Identidad de Jacobi 148
VIII.6. Propiedades adicionales del conmutador 149
VIII.7. Algunas propiedades de conmutación de los operadores inversos 150
VIII.8. Conmutador del producto de operadores que conmutan 151
VIII.9. Cálculo de los conmutadores fundamentales $[\hat{x}, \hat{H}]$ y $[\hat{p}, \hat{H}]$ 151
VIII.10. Representación de un operador con espectro continuo 151
VIII.11. Representaciones diversas de la relación de completez 152
VIII.12. Propiedad asociativa de los elementos de matriz en la notación de Dirac 153
VIII.13. Conmutación y eigenfunciones comunes de operadores. Notación de Dirac 153
VIII.14. Expresión general para la dispersión de un operador hermitiano 154
VIII.15. Desigualdades de Heisenberg para un pozo rectangular infinito 155
VIII.16. Estimación del radio característico del átomo de hidrógeno 156
VIII.17. Ecuación diferencial para paquetes de mínima dispersión 157

VIII.18. Propiedes de los operadores de proyección 158
VIII.19. Desarrollo de la función de Green en términos de funciones ortonormales 160
VIII.20. Desigualdades de Heisenberg para los operadores p, sen λx y cos λx 161
VIII.21. Expresiones asintóticas para un paquete minimal de electrones libres 162
VIII.2. Problemas adicionales 164
VIII.22. Eigenvalores y condiciones de frontera en un caso simple 164
*VIII.23. Determinación de vectores y valores propios de un operador lineal 165
VIII.24. Hermiticidad del operador de paridad 166
VIII.25. Operador de traslación espacial 167
VIII.26. Propiedades del operador $\hat{A}^n$ 168
VIII.27. Valores bien definidos de una variable dinámica y eigenvalores 169
VIII.28. Operador de conjugación de carga y sus eigenestados 170
VIII.29. Relación entre las representaciones de momentos y de coordenadas 170
VIII.3. Ejercicios 171

IX. Propiedades dinámicas de los sistemas cuánticos 175
IX.1. Problemas del texto 175
IX.1. a) Separación de un operador en sus partes hermitiana y antihermitiana b) Operadores $\hat{r}$, $\hat{p}$, $\hat{L}$ y de paridad 175
IX.2. Propiedades de los paréntesis de Poisson. Identidad de Jacobi 177
IX.3. Conmutador de un operador con una función de operadores 178
IX.4. Una propiedad del operador exponencial de un producto 179
IX.5. Evolución del operador de energía cinética 179
IX.6. Teorema de Ehrenfest con un campo magnético externo 180
IX.7. Transformaciones locales de norma 181
IX.8. Cálculo de $[\hat{q}_i, \hat{p}_j^n]$ y $[q_i, f(p)]$ 183
IX.9. Invariancia del espectro de un operador ante transformaciones unitarias 184
IX.10. Ecuación de movimiento de un operador en la descripción de Heisenberg 184
IX.11. Equivalencia entre las descripciones de Schrödinger y Heisenberg 185
IX.12. Teorema cuántico del virial 185
IX.13. Desigualdades de Heisenberg a tiempos diferentes 186
IX.14. Desigualdades de Heisenberg a tiempos diferentes 187
IX.15. Cambio brusco en las dimensiones de una caja de potencial 188
IX.16. Evolución de la variancia de la posición en general 189

IX.17. Versión tensorial del teorema del virial 190
IX.18. Regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn 191
IX.19. Regla de suma con dos observables diferentes . . . 192
IX.2. Problemas adicionales 193
IX.20. Conmutación de operadores, eigenfunciones comunes y degeneración 193
IX.21. Solución de una paradoja asociada al teorema de Ehrenfest 194
IX.22. Descripción de Heisenberg de una partícula sujeta a una fuerza constante 194
IX.23. Invariancia de la ecuación de continuidad ante transformaciones de norma 196
*IX.24. Efecto Aharonov-Bohm y similares 197
IX.3. Ejercicios 200

X. Tópicos complementarios de la teoría de representaciones 203
X.1. Problemas del texto 203
X.1. Cambio de representación 203
X.2. Invariancia de la paridad de un estado ante un cambio de representación 204
X.3. No diagonalidad de la derivada de la delta de Dirac 204
X.4. Solución del potencial delta de Dirac en la representación de momentos 205
X.5. Operadores de proyección para un sistema de dos partículas de espín $1/2$ 206
X.6. Operadores de proyección en términos de diadas . 206
X.7. Proyectores con traza arbitraria 207
X.8. Probabilidad de un estado como valor esperado de un proyector 208
X.9. Producto de Kronecker 209
X.10. Conmutador de operadores en diferentes espacios de Hilbert 209
X.11. Producto tensorial y proyectores 210
X.12. La función $A(\mathbf{r})/r$ en la representación de momentos 210
X.2. Problemas adicionales 211
X.13. Periodicidad temporal de un sistema descrito por un hamiltoniano diagonal 211
*X.14. Propiedades generales de observables cuyo conmutador es una constante 211
X.15. Descripción en el espacio de Hilbert de una cadena lineal de n partículas 213
X.16. Invariancia de eigenvalores ante una traslación temporal 215
X.17. Cambio brusco de una caja de potencial y distribución de momentos 216
X.18. Partícula en un campo de fuerzas uniforme. Representación de momentos 217
X.19. Transformaciones galileanas en el espacio de momentos 219
X.20. Construcción de una transformación unitaria con el invariante $\hat{x}^2 + \hat{p}^2$ 220
X.3. Ejercicios 222

XI. El oscilador armónico unidimensional 225
XI.1. Problemas del texto 225
XI.1. Solución de la ecuación de Schrödinger del oscilador armónico 225
XI.2. Normalización de la función de onda de un paquete de osciladores 227
XI.3. Dispersión de la posición y el momento del paquete coherente 227
XI.4. Evolución del paquete coherente de osciladores . . 228
XI.5. Energía del estado base del oscilador armónico y desigualdades de Heisenberg 229
XI.6. Teorema del virial para estados estacionarios del oscilador 230
XI.7. Variancia de la posición para el estado base del oscilador 231
XI.8. Desigualdad de Heisenberg para un estado estacionario del oscilador 232
XI.9. Paquete minimal de osciladores armónicos en términos de eigenestados 234
XI.10. Degeneración del espectro del oscilador armónico isotrópico 236
XI.11. Potencia radiada por un oscilador armónico clásico y cuántico 237
XI.12. Propiedades básicas de los operadores de creación y aniquilación 238
XI.13. Conmutador de los operadores de creación y aniquilación y el hamiltoniano 239
XI.14. Elementos de matriz del operador de posición y de su cuadrado 240
XI.15. Representación matricial de los operadores de creación y aniquilación 240
XI.16. Representación matricial de los operadores de posición y momento 241
XI.17. Operadores de dezplazamiento 242
XI.18. Hamiltoniano del oscilador con término lineal en los operadores $\hat{a}$ y $\hat{a}^\dagger$ 244
XI.19. Estados propios del operador de aniquilación . . . 245
XI.20. Cambio brusco de la frecuencia de un oscilador armónico 246
XI.21. Propagador de Feynman para el oscilador armónico 248
XI.22. Frecuencias normales para dos osciladores acoplados 250
XI.23. Desigualdades de Heisenberg para tiempos diferentes 252
XI.2. Problemas adicionales 253
*XI.24. Representación del operador de creación del oscilador armónico 253
XI.25. Función de Green del oscilador armónico 255
XI.26. Dispersión constante simultánea de la posición y el momento 256

XI.27. Los estados coherentes son de mínima dispersión . 258
XI.28. Estados coherentes en la representación de coordenadas 258
XI.29. Determinación simple de la evolución de un estado coherente del oscilador 260
XI.30. El oscilador armónico en el espacio de momentos 261
XI.31. Teorema de desenmarañamiento 262
XI.3. Ejercicios 264

XII. Introducción a la teoría del momento angular 267
XII.1. Problemas del texto 267
XII.1. Hermiticidad de los operadores de momento angular 267
XII.2. Operador de momento angular en coordenadas esféricas 267
XII.3. Coeficiente de normalización de los armónicos esféricos 268
XII.4. Momento angular de un sistema de dos partículas 269
XII.5. Relaciones de conmutación del momento angular relativo y CM 270
XII.6. Propiedades de la componente radial del operador de momento 271
XII.7. Relaciones de conmutación de la componente radial del momento 272
XII.8. Problema de valores propios para el momento radial 272
XII.9. Algunas relaciones de conmutación del operador de momento angular 273
XII.10. Relación algebraica entre los operadores de momento lineal y momento angular 274
XII.11. Relaciones de conmutación de los operadores de momento angular 275
XII.12. Conmutación de un operador con los operadores de momento angular 276
XII.13. Elementos de matriz del momento angular 277
XII.14. Matrices de Pauli 278
XII.15. Propiedades de anticonmutación de las matrices de Pauli 279
XII.16. Productos de matrices de Pauli 280
XII.17. Base para la representación de matrices de dimensión 2×2 281
XII.18. Operadores de proyección para espín $1/2$ 282
XII.19. Representación matricial del momento angular para $j = 1$ y $j = 3/2$ 282
XII.20. Matrices de Pauli en una dirección arbitraria . . . 285
XII.21. Representación matricial de los operadores de momento angular 287
XII.22. Condición para que las componentes del momento angular estén definidas 287
XII.23. Relaciones de recurrencia entre coeficientes de Clebsch-Gordan 288

XII.24. Acoplamiento de un momento angular y un momento espinorial 289
XII.25. Coeficientes de acoplamiento de un momento angular $j = 1$ y un espín $1/2$ 290
XII.26. Coeficientes de ClebschGordan para acoplamiento de $j = 1/2$ y $j = 1$ 291
XII.27. Propiedades de los coeficientes de acoplamiento con un espín $1/2$ 292
XII.28. Funciones de estado del singulete y el triplete de dos espines $1/2$ 293
XII.29. Ortogonalidad de los estados del acoplamiento de $j = 1$ y $s = 1/2$ 294
XII.30. Relación del triángulo para momentos angulares acoplados 295
XII.31. Acción del operador de ascenso para un sistema de dos partículas 296
XII.32. Momento angular de un fotón 296
XII.2. Problemas adicionales 297
XII.33. Sistemas que emiten partículas de espín semientero 297
XII.34. Consecuencias de la invariancia ante el operador de rotaciones 298
XII.35. Momento angular y operadores cartesianos de ascenso y descenso 299
XII.36. Haz polarizado de partículas de espín 1 300
XII.37. Proyección de un espinor sobre un eje arbitrario . 301
XII.38. Un problema de eigenvalores para operadores de espín $1/2$ 302
XII.39. Vectores propios de un sistema de tres espines $1/2$ 303
XII.40. Evolución temporal de un sistema con dos estados 306
XII.41. Niveles de energía de electrones en un campo magnético uniforme 307
XII.42. Operador de rotaciones de un cuerpo rígido . . . 308
XII.43. Funciones de Wigner para $j = 1/2$ y 1 310
XII.44. Estados de isoespín de sistemas de un pión y un nucleón 310
XII.3. Ejercicios 311

XIII. Potenciales centrales. El átomo de hidrógeno 317
XIII.1. Problemas del texto 317
XIII.1. Ecuaciones de Heisenberg para el problema de dos cuerpos 317
XIII.2. Separación de la ecuación de Schrödinger para el problema de dos cuerpos 318
XIII.3. Separación de la función de onda de un sistema de dos partículas libres 318
XIII.4. Molécula diatómica en un potencial gravitatorio y en un potencial eléctrico 320
XIII.5. Coordenadas normales de dos osciladores armónicos acoplados elásticamente 322

XIII.6. Coeficientes que aparecen en el cálculo de elementos de matriz angulares 324
XIII.7. Estimación de la energía del estado base del átomo de hidrógeno 327
XIII.8. Normalización de la función radial del átomo hidrogenoide 327
XIII.9. Función hipergeométrica confluente y polinomios de Laguerre 328
XIII.10. Función hipergeométrica confluente y función radial del oscilador isotrópico 329
XIII.11. Máximo de la densidad radial hidrogenoide para $l = n - 1$ 332
XIII.12. Excentricidad de las órbitas hidrogenoides 332
XIII.13. Valor esperado de r^n, $n = -3, \ldots, 2$, para el átomo hidrogenoide 334
XIII.14. Relación de recurrencia de Kramers 338
XIII.15. Relación de recurrencia de Kramers para un potencial $\sim r^s$ 340
XIII.16. Valor esperado de r^n en el estado base hidrogenoide 341
XIII.17. Átomo hidrogenoide con potencial adicional γ/r^2 341
XIII.18. Relación entre el momento magnético y el momento angular orbital 342
XIII.19. Componentes para y diamagnética del momento magnético atómico 343
XIII.20. Campo magnético medio generado por el movimiento orbital del electrón 345
XIII.21. Coeficientes de Einstein del hidrógeno 346
XIII.22. Vida media del estado $3s$ hidrogenoide 347
XIII.23. Vida media de estados hidrogenoides que decaen con emisión en el visible 348
XIII.24. Inexistencia de estados ligados excitados del deuterón 349
XIII.25. Desfasamiento de la onda s debido a un potencial esférico uniforme 349
XIII.26. Onda plana y eigenestados de $\hat{L}_z$ 350
XIII.27. Representación de la delta de Dirac en términos de funciones de Bessel 350
XIII.28. Estados degenerados y conmutación de operadores 350
XIII.29. Relación entre los espectros del potencial de Morse y del hidrógeno 352
XIII.2. Problemas adicionales 355
XIII.30. Una función hidrogenoide y sus números cuánticos 355
XIII.31. Valor medio de la energía cinética para un átomo hidrogenoide 356
XIII.32. Potencial exponencial y estado base del deuterón 357
XIII.33. Estados estacionarios de un oscilador isotrópico bidimensional 359
XIII.34. Estados coherentes de un oscilador isotrópico bidimensional 363

XIII.35. Determinación del espectro del átomo hidrogenoide con el método WKB 364
XIII.36. Estados ligados en un potencial central del tipo delta de Dirac 366
*XIII.37. Periodo medio asociado al movimiento orbital . . 367
XIII.3. Ejercicios 369

XIV. Métodos aproximados II: teoría de perturbaciones independientes del tiempo. Efecto Stark 373
XIV.1. Problemas del texto 373
XIV.1. Oscilador unidimensional con perturbación ax^3+bx^4 373
XIV.2. Elementos de matriz de una observable a primer orden 379
XIV.3. Perturbación gravitatoria de un rotor plano . . . 380
*XIV.4. Tratamiento exacto y perturbativo de un péndulo plano cuántico 381
XIV.5. Tratamiento perturbativo del efecto Zeeman normal 386
XIV.6. Transformación unitaria entre estados degenerados y perturbativos correctos 386
XIV.7. Efecto Stark lineal y número cuántico principal . 387
*XIV.8. Tratamiento del efecto Stark lineal y cuadrático con el método WKB 387
XIV.9. Ecuación diferencial para el efecto Stark cuadrático 390
XIV.10. Solución de la ecuación diferencial para el efecto Stark cuadrático 391
XIV.11. Efecto Stark para los niveles hidrogenoides con $n = 3$ 392
XIV.12. Intensidades de las componentes Stark de la línea H_α 395
XIV.13. Efecto Stark a segundo orden para niveles hidrogenoides con $n = 2$ 400
XIV.14. Elementos de matriz para dos osciladores armónicos acoplados 403
XIV.15. Corrección a la energía de dos osciladores acoplados a segundo orden 404
XIV.16. Funciones de onda para el problema anterior . . . 406
XIV.17. Funciones de onda correctas y modos normales para el problema anterior 408
XIV.18. Tratamiento exacto y perturbativo de dos osciladores armónicos acoplados 410
XIV.19. Espectro de emisión de dos osciladores armónicos acoplados 413
XIV.20. Osciladores armónicos acoplados con un potencial gaussiano 414
XIV.21. Corrección a la energía debida a una perturbación general hermitiana 416
XIV.2. Problemas adicionales 418
XIV.22. Solución exacta y perturbativa de un sistema de dos estados 418

XIV.23. Cambio repentino de la carga nuclear en un átomo hidrogenoide 420
XIV.24. Efecto Zeeman para átomo hidrogenoide con un potencial armónico 421
*XIV.25. Efecto Stark a quinto orden en el estado base de un átomo hidrogenoide 423
XIV.26. Efectos del tamaño finito del núcleo y de la corrección relativista a la masa 426
XIV.27. Transformación canónica de Bogoliubov 427
XIV.3. Ejercicios 428

XV. El espín del electrón 433
XV.1. Problemas del texto 433
XV.1. Relaciones de conmutación de momentos angulares 433
XV.2. Funciones de las matrices de Pauli 434
XV.3. Generalización de la fórmula de Euler con matrices de Pauli 435
XV.4. Matrices que anticonmutan con las matrices de Pauli 436
XV.5. Operador de rotación y las matrices de Pauli . . . 436
XV.6. Espinores que son eigenestados del espín en el plano xOy 438
XV.7. Matriz de rotación para un espinor 439
XV.8. Ecuación de Pauli para partícula libre 440
XV.9. Ecuaciones para las componentes de un espinor de Pauli 441
XV.10. Factorización de la función de onda de Pauli . . . 443
XV.11. Valor esperado de la proyección del espín sobre el eje Oz 444
XV.12. Corrección relativista a la energía cinética en el átomo hidrogenoide 444
XV.13. Corrección debida a la estructura nuclear en el átomo hidrogenoide 445
XV.14. Acoplamiento espín-órbita en el oscilador tridimensional isotrópico 446
XV.15. Eigenvectores de un sistema de tres electrones . . 448
XV.2. Problemas adicionales 450
XV.16. Integrales de movimiento para partícula en un campo magnético 450
XV.17. Densidad de probabilidad y de flujo asociadas a la ecuación de Pauli 452
XV.18. Precesión de Larmor 454
XV.19. Resonancia magnética con partículas de espín $1/2$ 456
XV.20. Método de Rabi para la medición del momento magnético 458
XV.21. Sistema con interacción espín-espín en un campo magnético homogéneo 460
XV.22. Descripción general de un sistema de dos niveles . 461
XV.3. Ejercicios 464

XVI. Sistemas de partículas iguales **467**
XVI.1. Problemas del texto 467
XVI.1. Hermiticidad del operador de intercambio 467
XVI.2. Proyectores de estados simétricos y antisimétricos 468
XVI.3. Perturbación debida a un potencial simétrico y efectos de intercambio 470
XVI.4. Funciones de onda para un sistema de tres partículas sin interacción 472
XVI.5. Intercambio de dos osciladores acoplados 473
XVI.6. Coordenadas normales de un sistema de tres bosones de espín cero 474
XVI.7. Eigenfunciones para un sistema de tres bosones iguales de espín cero 475
XVI.8. Dos osciladores iguales, sin espín, acoplados por un potencial gaussiano 478
XVI.9. Eigenfunciones de un sistema de cuatro osciladores desacoplados 478
XVI.2. Problemas adicionales 482
XVI.10. Estados base de un sistema de dos electrones independientes confinados 482
XVI.11. Sistema unidimensional de tres electrones en interacción 483
XVI.12. Estados simétricos y antisimétricos de dos partículas con espín s 484
XVI.13. Movimiento relativo de un sistema de dos partículas iguales 484
XVI.14. Conmutadores del operador de intercambio de dos partículas 485
XVI.3. Ejercicios 486

XVII. Métodos aproximados III: Absorción y emisión de radiación **489**
XVII.1. Problemas del texto 489
XVII.1. Relación entre el método variacional y la teoría de perturbaciones 489
XVII.2. Soluciones variacionales del oscilador armónico . . 489
XVII.3. Soluciones variacionales para el estado base del oscilador armónico 493
XVII.4. Tratamiento variacional y WKB del rotor plano . 496
XVII.5. Tratamiento variacional de una partícula en un potencial de Yukawa 499
XVII.6. Tratamiento variacional y WKB de un oscilador armónico truncado 501
XVII.7. Análisis variacional de los estados ligados de un potencial atractivo 505
XVII.8. Determinación de la energía de un átomo con el método Hartree-Fock 506
*XVII.9. Fuerzas de van der Waals entre dos moléculas neutras simples 508

XVII.10. Transiciones periódicas producidas por una perturbación adiabática 511
XVII.11. Probabilidad de transición debida a una perturbación impulsiva 513
XVII.12. Transiciones producidas por una perturbación súbita de un oscilador 514
XVII.13. Probabilidad de transición para un sistema de dos estados degenerados 516
XVII.14. Coeficiente B de Einstein para procesos de absorción resonante 518
XVII.15. Probabilidad de transición cuadrupolar espontánea en un átomo 520
XVII.16. Reglas de selección para transiciones cuadrupolares eléctricas 523
XVII.2. Problemas adicionales 525
XVII.17. Estimación variacional de la energía del estado base hidrogenoide 525
XVII.18. Tratamiento variacional de un átomo hidrogenoide con perturbación γ/r^2 525
XVII.19. Análisis variacional para una barrera impenetrable y potencial lineal 526
XVII.20. Análisis variacional del quarkonio 528
XVII.21. Transiciones de un oscilador en un campo eléctrico uniforme y pulsante 529
XVII.22. Transiciones de un átomo de H en un campo eléctrico uniforme y pulsante 530
XVII.23. Probabilidad de excitación de un átomo cuyo núcleo recibe un impulso 530
*XVII.24. Partícula con espín en dos campos magnéticos cruzados, uno periódico 532
*XVII.25. Teoría de perturbaciones en la descripción de interacción 534
XVII.26. Evolución de una integral de movimiento debida a una perturbación 539
XVII.27. Transiciones en un átomo excitado con Z electrones y sólo dos niveles 540
XVII.28. Método Hartree-Fock para un sistema de dos fermiones acoplados 543
*XVII.29. Efectos de un campo cuantizado sobre un átomo de dos niveles 544
*XVII.30. Modelo de Jaynes y Cummings 549
**XVII.31. El efecto fotoeléctrico tratado en primera cuantización 550
XVII.3. Ejercicios 552

XVIII. Estructura atómica. Modelo de capas nuclear 555
XVIII.1. Problemas del texto 555
XVIII.1. Configuración electrónica del F, Ca y Rb 555
XVIII.2. Ecuación de Schrödinger para el movimiento interno de N cuerpos 556

XVIII.3. Estimación variacional de la energía de disociación del H . . . 558
XVIII.4. Transiciones dipolares entre los estados orto- y para- del helio . . . 559
*XVIII.5. Fórmula general de Rydberg, incluyendo el defecto cuántico . . . 560
XVIII.6. Números mágicos nucleares predichos por el modelo de oscilador armónico . . . 563
XVIII.2. Problemas adicionales . . . 563
XVIII.7. Relación entre los sistemas de unidades internacional y atómico . . . 563
*XVIII.8. Probabilidad del estado base atómico del tritio frente al decaimiento beta . . . 564
XVIII.9. Estimación de la energía del estado base de un átomo helioide . . . 566
XVIII.10. Funciones de onda de la configuracion $1s2s$ de un átomo de He . . . 568
XVIII.11. Potencial efectivo de repulsión entre electrones de un átomo de He excitado . . . 569
*XVIII.12. Cálculo variacional de la energía del estado base del litio . . . 570
XVIII.13. Configuración electrónica de las tierras raras . . . 572
*XVIII.14. Reglas de Slater para la carga nuclear efectiva . . . 573
XVIII.15. Carga nuclear efectiva de un electrón $3d$ y un electron $4s$ del hierro . . . 575
XVIII.3. Ejercicios . . . 575

XIX. Moléculas **577**
XIX.1. Problemas del texto . . . 577
XIX.1. Traslape de las funciones de un electrón referidas a dos núcleos . . . 577
XIX.2. Determinación de la energía del ión H_2^+ . . . 579
XIX.3. Estado base de la molécula de hidrógeno . . . 580
XIX.4. Fuerzas de van der Waals y potencial de enlace de la mólecula de H_2 . . . 581
XIX.5. Legitimización del principio de Franck y Condon . 581
XIX.6. Determinación a cuarto orden de la energía de una molécula diatómica . . . 582
XIX.7. Potencial de Morse y energía electrónica hasta cuarto orden . . . 584
XIX.8. Transición vibracional en una molécula de LiH . . 585
XIX.9. Distancia de equilibrio entre los átomos de la molécula de HCl . . . 586
XIX.2. Problemas adicionales . . . 587
XIX.10. Espectro rotacional y vibracional de un modelo de molécula diatómica . . . 587
XIX.11. Potencial efectivo para oscilaciones pequeñas de la molécula diatómica . . . 589
XIX.12. Uso de coordenadas elípticas en el cálculo de la energía del ión H_2^+ . . . 590

XIX.13. Momento dipolar eléctrico de una molécula diatómica heteronuclear . . . 591
*XIX.14. Propiedad de aditividad de las fuerzas de van der Waals . . . 592
XIX.3. Ejercicios . . . 593

XX. Teoría de la dispersión 595
XX.1. Problemas del texto . . . 595
XX.1. Sistemas de laboratorio y CM en un problema de dos cuerpos . . . 595
XX.2. Sección eficaz elástica en el sistema de laboratorio y el de CM . . . 597
XX.3. Generalización al caso de colisiones binarias inelásticas . . . 598
XX.4. Retroceso del blanco en una colisión elástica . . . 599
XX.5. Distribución angular de las partículas blanco en una colisión elástica . . . 600
XX.6. Atenuación lineal por un blanco grueso . . . 601
XX.7. Dispersión por una barrera esférica unforme. Aproximación de Born . . . 602
XX.8. Efecto Ramsauer-Townsend en un pozo esférico uniforme . . . 603
XX.9. Dispersión de neutrones lentos por protones. Estado base del deuterón . . . 607
XX.10. Dispersión de partículas extensas por blancos con estructura . . . 608
XX.11. Dispersión de protones por una hoja delgada de aluminio . . . 609
XX.12. Dispersión de neutrones por una hoja fina de núcleos pesados . . . 611
XX.13. Estados ligados en un pozo esférico uniforme profundo . . . 613
XX.14. Desfasamientos en la aproximación de Born . . . 615
XX.15. Unitaridad de la matriz $\hat{S}$ y conservación del flujo de partículas . . . 616
XX.16. Teorema óptico para dispersión elástica . . . 618
XX.17. Teorema óptico para dispersión inelástica . . . 620
XX.18. Dispersión $p-n$ en la aproximación de rango efectivo 621
XX.19. Ecuaciones de Lippman-Schwinger . . . 622
XX.2. Problemas adicionales . . . 625
XX.20. Dispersión de partículas clásicas por un potencial central . . . 625
XX.21. Fórmula de Rutherford para el caso clásico . . . 626
XX.22. Desarrollo de Born hasta segundo orden en la representación de coordenadas . . . 627
XX.23. Sección diferencial de dispersión y teoría de perturbaciones . . . 629
XX.24. Primera aproximación de Born para el potencial coulombiano . . . 630

XX.25. Fracción de partículas dispersadas dentro de un cono agudo . . . 631
XX.26. Dispersión elástica de electrones hacia adelante . 632
XX.27. Desfasamiento de la onda s debido a un potencial delta de Dirac . . . 632
XX.28. Dispersión elástica de deuterones por deuterones en el sistema CM . . . 633
XX.29. Dispersión de neutrones lentos con inversión del espín . . . 634
XX.30. Efecto del espín total del sistema en la dispersión de neutrones por protones . . . 634
*XX.31. Efectos de la conservación del isoespín en la dispersión elástica $\pi - N$ . . . 635
XX.32. Desfasamientos debidos a un potencial central y método WKB . . . 637
XX.3. Ejercicios . . . 638

XXI. La matriz de densidad 641
XXI.1. Problemas del texto . . . 641
XXI.1. Invariancia de la traza del producto de operadores frente a su reordenamiento . . . 641
XXI.2. Condición para que una matriz de densidad describa un estado puro . . . 641
XXI.3. La matriz de densidad media de un estado puro describe una mezcla . . . 642
XXI.4. Imposibilidad de la reducción unitaria de una mezcla a un estado puro . . . 643
XXI.5. Ejemplos de operadores que representan una matriz de densidad . . . 643
XXI.6. Matriz de densidad general para un sistema con dos estados ortonormales . . . 645
XXI.7. Acción de los proyectores de espín 1/2 sobre una matriz de densidad . . . 646
XXI.8. Operador de densidad y vector de polarización para un estado puro . . . 648
XXI.9. Matriz de densidad para un sistema de tres estados 648
XXI.10. Distribución de Planck, incluyendo la energía de punto cero . . . 649
XXI.11. Teorema del virial para un ensamble canónico de osciladores bosónicos . . . 650
XXI.12. Momento paramagnético de un átomo. Fórmula de CurieLangevin . . . 652
XXI.13. Matriz de densidad para un ensamble canónico de osciladores armónicos . . . 653
XXI.14. Solución de la ecuación de Bloch para osciladores armónicos . . . 655
XXI.15. Límites $T \to 0$ y $T \to \infty$ del ensamble canónico de osciladores armónicos . . . 656
XXI.16. Solución de la ecuación de Bloch para partícula libre 657

XXI.17. Matriz de densidad de partícula libre en la representación de momentos . . . 658
XXI.18. Matriz de densidad y propagador de partícula libre 659
XXI.19. Valor medio de la derivada temporal del operador de densidad . . . 660
XXI.20. Ecuación de von Neumann en la representación de coordenadas . . . 660
XXI.21. Condición para que una matriz de densidad reducida sea idempotente . . . 661
XXI.22. Teoría de perturbaciones de la matriz de densidad a primer orden . . . 663
XXI.23. Peso de un estado como valor medio de un proyector 666
XXI.2. Problemas adicionales . . . 666
XXI.24. Evolución unitaria de un estado puro . . . 666
XXI.25. Transformación de un estado puro en una mezcla al tomar promedios . . . 668
XXI.26. Propiedades de la traza del cuadrado de la matriz de densidad . . . 668
XXI.27. Matriz de densidad para partículas en una caja de potencial . . . 669
XXI.28. Matriz de densidad para un electrón en un campo magnético . . . 671
*XXI.29. Operador de densidad reducido de un sistema con dos subsistemas . . . 672
XXI.30. Determinación de la matriz de densidad para un haz de luz . . . 674
*XXI.31. Matriz de densidad para un átomo de dos estados con Z electrones . . . 676
XXI.32. Distribución de Wigner para una y dos partículas libres . . . 678
XXI.3. Ejercicios . . . 679

XXII. Ecuaciones cuánticas relativistas 683
XXII.1. Problemas del texto . . . 683
XXII.1. Ecuación de Klein-Gordon para un potencial atractivo isotrópico . . . 683
XXII.2. Representaciones de Dirac-Pauli, Kramers-Weyl y Majorana . . . 688
XXII.3. Transición de la representación de Dirac-Pauli a la de Kramers-Weyl . . . 690
XXII.4. Ecuaciones de Heisenberg para las matrices α_k . . 692
XXII.5. Operador de Dirac de acoplamiento espín-órbita . 693
XXII.6. Construcción de los espinores esféricos de la teoría de Dirac . . . 697
XXII.7. Solución a la ecuación de Dirac para el pozo esférico uniforme . . . 699
XXII.8. Reglas de selección del átomo hidrogenoide en la teoría de Dirac . . . 704
XXII.9. Conmutador del hamiltoniano de Dirac de partícula libre y el operador $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ . . . 708

XXII.10. Hamiltoniano de Dirac en la represetación de Foldy-Wouthuysen 708
XXII.11. Ecuaciones de movimiento para acoplamiento minimal en la teoría de Dirac 712
XXII.12. Zitterbewegung de una partícula en un campo magnético uniforme 714
XXII.13. Soluciones del problema anterior para el espín $\sigma_i(t)$ 717
*XXII.14. Movimiento de una partícula en un campo eléctrico uniforme 719
*XXII.15. Operadores en la representación de Foldy-Wouthuysen 724
XXII.2. Problemas adicionales 728
XXII.16. Ecuación de Klein-Gordon y conservación del número de partículas 728
XXII.17. Eigenfunciones de Dirac para un electrón en un campo magnético uniforme 728
XXII.18. Separación de un operador de Dirac en sus partes par e impar 733
*XXII.19. Teoría de dos componentes para el neutrino . . . 735
XXII.20. Operador de helicidad y matriz γ_5 738
XXII.3. Ejercicios 739

XXIII. La electrodinámica estocástica 741
XXIII.1. Problemas del texto 741
XXIII.1. Energía del estado base del oscilador armónico . . 741
XXIII.2. Espectro del campo de punto cero capaz de soportar átomos estables 744
XXIII.3. Densidad espectral y autocorrelaciones del campo electromagnético 746
XXIII.4. Dinámica del oscilador armónico inmerso en el campo de punto cero 749
XXIII.5. Propiedades estadísticas de $x(t)$ para el oscilador armónico estacionario 752
XXIII.6. Dispersión de la energía del estado base del oscilador 755
XXIII.7. Energía media de un ensamble de osciladores armónicos en equilibrio 756
XXIII.8. Velocidades sistemática y estocástica 757
XXIII.2. Problemas adicionales 759
XXIII.9. Expresión general para la velocidad estocástica . 759
XXIII.10. Significado del orden de dos operadores 760
XXIII.11. Estabilidad del estado base en un átomo hidrogenoide modelo 761
*XXIII.12. Electrodinámica estocástica lineal 763
XXIII.3. Ejercicios 766

Apéndices matemáticos **769**
A.1. Algunas constantes y unidades físicas 769
A.2. Identidades de uso frecuente 770
A.3. Coordenadas curvilíneas 771
A.3.1. Coordenadas esféricas 771
A.3.2. Coordenadas cilíndricas 772
A.3.3. Coordenadas parabólicas 773
A.4. Delta de Dirac 774
A.5. Función gamma 774
A.6. Polinomios ortogonales y funciones especiales 775
A.6.1. Polinomios de Hermite 775
A.6.2. Polinomios de Legendre 776
A.6.3. Polinomios asociados de Legendre 777
A.6.4. Armónicos esféricos 778
A.6.5. Polinomios de Laguerre 779
A.6.6. Polinomios asociados de Laguerre 780
A.6.7. Funciones cilíndricas de Bessel 781
A.6.8. Funciones modificadas de Bessel 782
A.6.9. Funciones esféricas de Bessel 783
A.6.10. Función hipergeométrica 785
A.6.11. Función hipergoemétrica confluente 786
A.7. Notación relativista 787
A.8. Respuestas a ejercicios seleccionados 788

Bibliografía **791**
1. Manuales y tablas matemáticas 791
2. Textos de mecánica cuántica 791
3. Problemarios de mecánica cuántica 793

Índice temático y onomástico **795**

Índice de figuras

I.1. Energía media de los osciladores de Planck como función de la frecuencia, a una temperatura dada. 6
I.2. Dispersión Compton de un fotón por un electrón. 10
I.3. Forma general del potencial V(r); se ilustra el caso k=10. 16

II.1. Comparación entre varias distribuciones normales para diferentes valores de la variancia. 31

III.1. Distribución inicial de electrones para el problema III.4. 44
III.2. Obtención de una base ortonormal a partir de un conjunto de vectores arbitrarios por el método de Gram-Schmidt para el caso n=3. 47

VI.1. Localización de los valores propios de la energía para el pozo cuadrado infinito. En (a) se muestran las soluciones pares y en (b) las impares. 96
VI.2. Pozo de potencial simétrico que produce un espectro discreto para $E < 0$ y un espectro continuo para $E > 0$. . . 97
VI.3. Pozo rectangular unidimensional finito. 99
VI.4. Barrera rectangular unidimensional. 101
VI.5. Pozo doble simétrico rectangular. 103
VI.6. Funciones de onda para $n = 1$ para el pozo rectangular doble. En (a) se muestran las soluciones deslocalizadas simétrica y antisimétrica, mientras que en (b) se muestran las soluciones que corresponden a partículas localizadas en un pozo. 105
VI.7. Funciones de onda entrante y saliente. 110
VI.8. Pozo rectangular finito con barrera infinita. 112
VI.9. Pozo para el ejercicio VI.22. 126

IX.1. Diagrama esquemático del efecto Aharonov-Bohm. . . . 199

XIV.1. Efecto Stark lineal para la línea H alfa, debido al desdoblamiento de los niveles $n = 2$ y $n = 3$. 396

XV.1. Método de Rabi para la medición del momento magnético. 459

XIX.1. Absorción de radiación electromagnética por HCl. . . . 587

XX.1. Coordenadas de laboratorio y CM; en (a) se muestran los vectores de posición y en (b) las velocidades. 597
XX.2. Dispersión de partículas por un potencial central. 625
XX.3. Dispersión elástica por una esfera rígida. 627

Prefacio

En este volumen se discute con detalle la solución de cada uno de los problemas sugeridos al lector en el texto *Introducción a la mecánica cuántica,* de Luis de la Peña, a los que se han agregado otros para redondear su contenido. Durante la elaboración del volumen se ha tenido presente en todo momento que mucho más importante que la mera solución de un ejercicio es el valor didáctico que el proceso de su solución puede tener para fijar y mejorar la comprensión del tema en estudio. Por esta razón, las discusiones son normalmente detalladas y, con mucha frecuencia, se les extiende bastante más allá de las fronteras que podrían considerarse naturales si el libro fuera un simple problemario. Por lo mismo, en muchos casos se presentan soluciones alternativas o discusiones complementarias, que tienen que ver más con la física involucrada que con el método a seguir, o bien, se agrega material para mostrar posibles aplicaciones del tema o del método empleado. Todo esto hace del volumen un auxiliar didáctico a ser usado de preferencia lado a lado con el correspondiente texto, preparado con la intención de ayudar al estudiante de mecánica cuántica a adquirir conocimientos más sólidos del tema, a la vez que experiencia y práctica suficientes en la solución de problemas, aspecto que constituye un apremiante escollo para la mayoría de los estudiantes del tema. Con el objeto de enriquecer el volumen y hacerlo de interés para un círculo más amplio de usuarios, se han agregado a los 340 problemas propuestos en el texto original, otros 171 agrupados en cada capítulo bajo el rubro de problemas adicionales, seleccionados para complementar apropiadamente los anteriores, lo que hace un total de 511 problemas resueltos en la obra. Finalmente, como colofón de cada capítulo se proponen nuevos ejercicios a resolver, hasta formar un total de 332.

Este libro, tal como sucede con el texto que le sirve de base, está destinado en primer lugar a los estudiantes de nivel de licenciatura que desean adquirir un sólido conocimiento de los principios de la mecánica cuántica, particularmente estudiantes de las carreras de física y afines, como algunas de las ingenierías modernas o la química teórica. Sin embargo, el nivel se extiende de manera natural hasta cubrir varios temas más propios de los estudios de posgrado o de cursos especializados, los que aparecen marcados en el texto de base con frecuencia con un asterisco. De manera análoga, los problemas que requieren de conocimientos o procedimientos de solución claramente más avanzados que los que corresponden al nivel introductorio han sido marcados con un asterisco o, de manera excepcional, con un doble asterisco. Las frecuentes discusiones complementarias a lo que sería la solución escueta de los problemas no han sido marcadas en forma alguna, de tal manera que es el propio contexto lo que debe orientar al alumno a distinguir una parte de otra, aunque con la intención de facilitar esta tarea, en ocasiones se abre tal discusión con alguna frase introductoria apropiada. En todo caso, es el interés del propio alumno el que debe decidir hasta donde avanza en cada ocasión.

La organización del volumen es directa; en la primera sección de cada capítulo se resuelven todos y cada uno de los problemas propuestos en *Introducción a la mecánica cuántica*, libro al cual se hace referencia simplemente como *el tex-*

to. Sigue en cada caso una segunda sección en que se resuelven y discuten de manera análoga los problemas adicionales, los que pueden cubrir cualquiera de los tópicos propios al capítulo y han sido ordenados por contenido siguiendo de manera aproximada al texto base. Finalmente, aparece la sección de ejercicios a resolver, en el mismo o cercano orden; el nivel de estos ejercicios es normalmente introductorio. La redacción de los problemas de la primera sección es la original del texto, aunque se dan de vez en cuando pequeños cambios de estilo. Sólo en un caso específico se encontró conveniente modificar el enunciado del problema para aumentar su interés didáctico.

A la preparación del presente volumen han ayudado muchas personas, directa o indirectamente, a todos los cuales los autores desean expresar su agradecimiento. En primer lugar, deben contarse los muchos estudiantes (aunque menos de lo que hubiera sido deseable) que a lo largo de los años aportaron sus comentarios y observaciones sobre los problemas del texto (o aún sobre el propio texto). Colaboraciones particularmente útiles y directas fueron las proporcionadas por el maestro en ciencias Maximino Aldana y el físico Alfonso Cortina, quienes revisaron los capítulos XVI y XVII, respectivamente, y la de la doctora Ana María Cetto, quien, de manera voluntaria y pese a sus múltiples tareas, se echó encima la de revisar con cuidado el texto del volumen completo. A su vez, el maestro en ciencias Eduardo Roa colaboró con sus comentarios a lo largo de la preparación del material. Todas las figuras fueron preparadas con el programa de dibujo técnico *Metagráfica*, gentilmente proporcionado por su autor, el físico Alejandro Aguilar.

Los autores han puesto el máximo cuidado para reducir al mínimo el número de errores, incluyendo los tipográficos. Sin embargo, les es claro que en obras como la presente de lo único que se puede estar seguro, es de que se han colado muchos más de lo que merece su esfuerzo y dicta su deseo. De antemano piden las debidas disculpas por ello, y solicitan de los lectores su comprensión y, sobre todo, su colaboración, haciéndoles llegar los comentarios u observaciones que crean pertinentes para mejorar la obra.

Luis de la Peña
Mirna Villavicencio

I. La mecánica cuántica primitiva

I.1. Problemas del texto

I.1 Obtenga las expresiones límite de la distribución de Planck para pequeñas y grandes frecuencias, a temperatura fija. ¿Cuál es la forma de la función $f(\omega/T)$ que aparece en la ley de Wien (ecuación (T1.10)[1]) para altas frecuencias y por qué no puede determinarse clásicamente? Discuta sus resultados.

La expresión de Planck para la densidad espectral del campo está dada por (T1.12)[2]

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}, \tag{I.1}$$

donde $\omega = 2\pi\nu$ representa la frecuencia angular. Con ayuda del desarrollo en serie de la función exponencial,

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n, \tag{I.2}$$

puede escribirse

$$e^{\hbar\omega/k_B T} - 1 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^n. \tag{I.3}$$

Consideremos una temperatura T fija, finita y diferente de cero. En el caso $\omega/T \to 0$ sólo el término de orden más bajo contribuye efectivamente, por lo que puede aproximarse

$$e^{\hbar\omega/k_B T} - 1 \simeq \frac{\hbar\omega}{k_B T}. \tag{I.4}$$

De aquí sigue

$$\rho(\omega) \approx \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{k_B T}{\hbar\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T, \tag{I.5}$$

[1] El prefijo T de las ecuaciones se refiere al libro de texto *Introducción a la mecánica cuántica*, de Luis de la Peña, UNAM/FCE, México, 1991.

[2] Esta expresión no contiene el término contribuido por la energía del punto cero y corresponde a la ley obtenida por Planck en su llamada *primera teoría* (termodinámica, con elementos heurísticos).

que es precisamente la expresión obtenida por Rayleigh y Jeans. Nótese que $\omega/T \to 0$ puede interpretarse como $\omega \to 0$ con T fija, o bien $T \to \infty$ con ω fija, caso que corresponde al límite clásico.

Si se compara la última expresión con la ley de Wien, ecuación (T1.10)[3]

$$\rho(\omega) = \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right), \tag{I.6}$$

resulta que para frecuencias bajas (o altas temperaturas)

$$f\left(\frac{\omega}{T}\right) = \frac{k_B T}{\pi^2 c^3 \omega}. \tag{I.7}$$

Por otro lado, a frecuencias altas (o bajas temperaturas), $e^{\hbar\omega/k_B T} \gg 1$, por lo que la distribución de Planck se puede aproximar por la llamada *distribución de Wien,*

$$\rho(\omega) \simeq \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\hbar\omega/k_B T}. \tag{I.8}$$

Comparando de nuevo con la ecuación (T1.10) vemos que ahora

$$f\left(\frac{\omega}{T}\right) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} e^{-\hbar\omega/k_B T}. \tag{I.9}$$

Como este resultado depende de manera esencial de la constante de Planck, no es posible derivarlo de consideraciones clásicas, a diferencia del caso correspondiente a bajas frecuencias. De hecho, el físico alemán Wilhelm Wien propuso su distribución en 1896 sobre bases heurísticas.

Los resultados anteriores muestran que para cualquier temperatura se tiene

$$f\left(\frac{\omega}{T}\right) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}. \tag{I.10}$$

Es claro que las dos expresiones obtenidas anteriormente no son sino el valor límite de esta función cuando $\omega/T \to 0$ ó ∞. Aquí también notamos que la dependencia en la constante de Planck explica la *imposibilidad* de determinar esta función con métodos puramente clásicos. De hecho, hemos seguido aquí el camino inverso al tomado por Planck: de su distribución obtuvimos los dos valores asintóticos, para $T \to \infty$ (límite clásico de altas temperaturas, aplicable sólo a bajas frecuencias para evitar la catástrofe ultravioleta y dado por la distribución de Rayleigh-Jeans) y para altas frecuencias (libre de tal catástrofe, pero aplicable sólo a bajas temperaturas y dado por la distribución de Wien), mientras que Planck interpoló heurísticamente entre estas dos distribuciones para construir una nueva, con la esperanza de que correspondiera (como sucedió) a la realidad.

I.2 Obtenga la ley de Stefan-Boltzmann $u = \text{cte} \times T^4$ a partir de la distribución de Planck.

La densidad de energía de un campo electromagnético en equilibrio contenida dentro del intervalo de frecuencias $d\nu = d\omega/2\pi$ es

$$\rho_T(\nu)\, d\nu = \frac{8\pi\nu^3 h}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu. \tag{I.11}$$

[3] A este resultado fundamental se le llama también en ocasiones *ley de desplazamiento de Wien*, aunque con este nombre se distingue con frecuencia una consecuencia específica y muy importante de ella, que mencionaremos más adelante en el problema I.3.

Al integrar esta cantidad sobre todas las frecuencias obtenemos la densidad de energía de un cuerpo negro a temperatura T. Con el cambio de variable $q = h\nu/k_BT$, queda

$$u(T) \equiv \int_0^\infty \rho_T(\nu)\, d\nu = \frac{8\pi k_B^4 T^4}{c^3 h^3} \int_0^\infty \frac{q^3}{e^q - 1} dq = \frac{8\pi k_B^4 T^4}{c^3 h^3} \cdot \frac{\pi^4}{15}, \tag{I.12}$$

donde se tomó en cuenta que (Gradshteyn y Ryzhik (1980), 3.411)

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \Gamma(4)\zeta(4) = 6\zeta(4), \tag{I.13}$$

con ζ una función Zeta de Riemann,

$$\zeta(4) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90}. \tag{I.14}$$

Es costumbre escribir este resultado, conocido como *ley de Stefan-Boltzmann*, en la forma

$$u = \frac{4\sigma}{c} T^4, \tag{I.15}$$

con la *constante de Stefan-Boltzmann* σ dada por

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15 c^2 h^3}. \tag{I.16}$$

Así, la ley de Planck explica la ley de Stefan-Boltzmann y permite determinar el valor de la constante que aparece en ella.[4]

I.3 Muestre que la ley de Planck predice que la densidad espectral de la radiación de cuerpo negro tiene un máximo para cada temperatura, que ocurre a la longitud de onda

$$\lambda_m = \frac{2\pi c\hbar}{4.965} \frac{1}{k_B T}.$$

Calcule ν_m y explique por qué $\nu_m \neq c/\lambda_m$. Este resultado —conocido como ley de desplazamiento de Wien— muestra que al elevarse la temperatura del cuerpo negro, el máximo de intensidad de la radiación se desplaza hacia las longitudes de onda cortas.

Reescribimos la densidad espectral de radiación de cuerpo negro en la forma (I.11), donde el subíndice T indica que consideramos una temperatura constante. Conviene primero expresar esta densidad en términos de la longitud de onda, para lo cual debemos determinar $\rho_T(\lambda)$. De la teoría general de cambio de variable se tiene $f(x)\, dx = f(x(y))\, |J|\, dy$, con $J = (\partial_x y)$ el jacobiano de la transformación. De $\nu = c/\lambda$ sigue

$$d\nu = -\frac{c}{\lambda^2} d\lambda$$

[4]La ley de Stefan-Boltzmann fue establecida como una relación empírica por J. Stefan en 1879 y derivada teóricamente por L. Boltzmann en 1884. Una discusión detallada puede verse, por ejemplo, en L. García-Colín, *La Naturaleza Estadística de la Teoría de los Cuantos* (UAM-I, México, 1987) y la bibliografía que ahí se menciona. Véase también E. Braun, *Una faceta desconocida de Einstein*, Colección La Ciencia desde México, No. 19 (FCE, México, 1986).

(el signo menos indica que a un aumento en la frecuencia corresponde una disminución en la longitud de onda, al ser estas variables inversamente proporcionales), lo que conduce a

$$\rho_T(\lambda) = \frac{c}{\lambda^2}\rho_T(c/\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1} \tag{I.17}$$

como la expresión para la densidad espectral de la radiación de cuerpo negro en términos de la longitud de onda.

Para encontrar el máximo de esta función se debe determinar el valor λ_m que satisface la condición

$$\left.\frac{d\rho_T(\lambda)}{d\lambda}\right|_{\lambda_m} = 0, \tag{I.18}$$

o sea

$$\frac{-5\lambda_m k_B T\left(e^{hc/\lambda_m k_B T} - 1\right) + hce^{hc/\lambda_m k_B T}}{\lambda_m^2 k_B T\left(e^{hc/\lambda_m k_B T} - 1\right)^2} = 0.$$

El denominador de esta expresión es siempre diferente de cero para λ_m y T finitas. Por lo tanto, sólo nos interesa la condición

$$-5\lambda_m k_B T\left(e^{hc/\lambda_m k_B T} - 1\right) + hce^{hc/\lambda_m k_B T} = 0,$$

es decir

$$e^{-x} + \tfrac{1}{5}x - 1 = 0, \tag{I.19}$$

en donde hemos sustituido $x = hc/\lambda_m k_B T$. Esta ecuación trascendente puede resolverse por aproximaciones sucesivas, obteniéndose

$$x \simeq 5(1 - e^{-5}) = 4.965\ldots$$

Por lo tanto,

$$\lambda_m = \frac{2\pi\hbar c}{4.965}\frac{1}{k_B T}. \tag{I.20}$$

En términos de la constante

$$b \equiv \frac{hc}{4.965 k_B} = 2.8978 \times 10^{-3}\ \mathrm{m}\cdot\mathrm{K}, \tag{I.21}$$

la *ley de desplazamiento de Wien* (I.20) toma la forma

$$\lambda_m T = b. \tag{I.22}$$

Esta ley establece que a medida que la temperatura de un cuerpo negro aumenta, el máximo de su distribución de energía se desplaza hacia longitudes de onda más cortas, lo que se observa como un cambio en el color del cuerpo (y explica el nombre dado a este resultado). La teoría permite así fijar h en términos del valor experimental de la constante de Wien b, que fue el método empleado por Planck para la determinación experimental de su constante. Es claro que b no es determinable por métodos clásicos.

El factor jacobiano diferente de la unidad en la transición de $\rho(\omega)$ a $\rho(\lambda)$ hace que la ecuación que determina la frecuencia a la que ocurre el máximo difiera de (I.19), por lo que en efecto no se cumple la relación $\nu_m = c/\lambda_m$. Esto se comprueba

calculando la frecuencia ν_m para la cual la derivada de $\rho(\nu)$ dada por (I.11) se anula, lo que conduce a la ecuación

$$e^{-x} + \tfrac{1}{3}x - 1 = 0, \quad x = h\nu_m/k_BT. \tag{I.23}$$

La ley de desplazamiento de Wien se utiliza ampliamente para investigar la temperatura de cuerpos calientes (con espectro similar al de cuerpo negro),[5] pues para ello basta conocer la longitud de onda a la cual la intensidad de radiación es máxima. Por ejemplo, aceptando que el espectro solar corresponda al de un cuerpo negro, del hecho de que la energía radiada por el Sol presenta un máximo a $\lambda_m \simeq 5 \times 10^3$Å sigue que la temperatura de la superficie solar es

$$T = 2.9 \times 10^{-3} \times \frac{1}{5} \times 10^{-3} \times 10^{10} \approx 5800 \text{ K}.$$

Otra aplicación interesante ocurre al considerar la radiación de fondo del universo, cuyo espectro corresponde a una planckiana de temperatura $T = 2.7$ K. A esta temperatura el máximo de la densidad de energía radiada corresponde a la longitud de onda $\lambda_m = 0.107$ cm, es decir, en la banda de microondas, hecho que facilitó la detección de esta radiación empleando precisamente detectores de microondas (véase el problema I.5).

I.4 Construya una gráfica de la energía media de los osciladores de Planck *versus* la frecuencia y úsela para mostrar que el postulado $E_n = n\hbar\omega$ introduce un corte en el espacio de las frecuencias. Determine esta frecuencia de corte. Este resultado muestra que el postulado mencionado impide que se exciten modos de frecuencia arbitrariamente alta a una temperatura dada.

Es conveniente partir de la siguiente observación. Sea x una variable aleatoria que puede tomar valores $x_1, x_2, \ldots, x_n$ con probabilidades $p_1, p_2, \ldots, p_n$ y $\sum_{i=1}^n p_i = 1$, de tal manera que $x_1 < x_2 < \ldots < x_n$. El valor medio $\bar{x}$ de x cumple entonces con

$$x_1 < \bar{x} < x_n. \tag{I.24}$$

En palabras: el valor medio de x está comprendido entre el menor y el mayor de los valores que esta variable puede alcanzar.

Consideremos ahora la energía de los osciladores de Planck como una variable aleatoria que puede tomar los valores $E_n(\omega) = n\hbar\omega$, con $n = 1, 2, 3, \ldots$, con probabilidades

$$p_n = \frac{1}{Z} e^{-E_n/k_BT}. \tag{I.25}$$

La función de partición $Z(T)$ es el factor de normalización que garantiza que $\sum_{n=1}^\infty p_n = 1$. Como $E_1 < E_2 < \ldots$, si $\bar{E}$ denota la energía promedio de los osciladores, de (I.24) sabemos que debe cumplirse que

$$\bar{E}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_BT} - 1} > E_1. \tag{I.26}$$

Para escribir la forma explícita de $\bar{E}(\omega)$ como función de la frecuencia se utilizó la ecuación (T1.35). En la figura I.1 se ilustran las cantidades $E_1(\omega)$, $E_2(\omega)$, ..., y

[5] La densidad de energía radiada por un cuerpo *no* negro es $(4\sigma/c)a(T)T^4$, con $a(T)$ el *poder absorbente* del cuerpo a la temperatura T. La relación $a(T) = 1$ se toma normalmente como la definición de cuerpo negro.

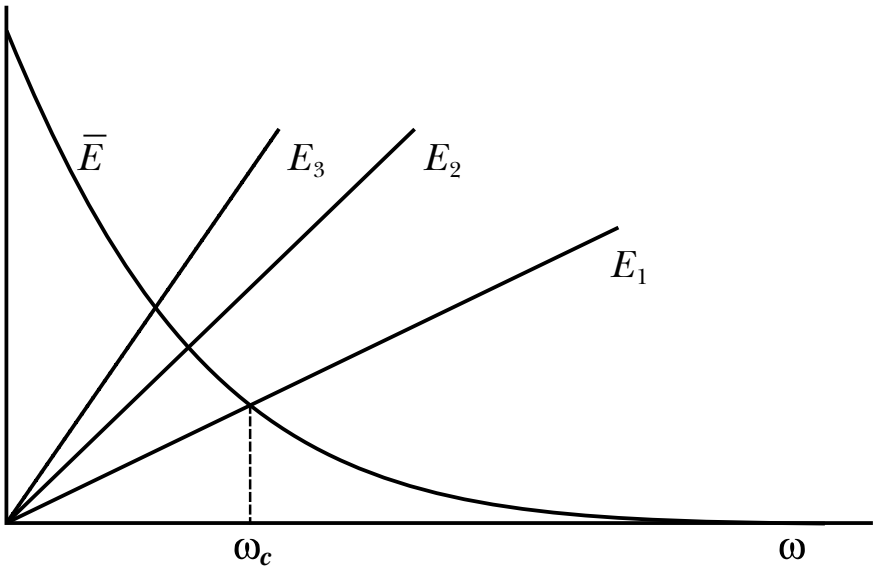


FIGURA I.1 *Energía media de los osciladores de Planck como función de la frecuencia, a una temperatura dada.*

$\bar{E}(\omega)$ como función de la frecuencia, así como la frecuencia ω_c, definida por la intersección de las trayectorias de $E_1(\omega)$ y $\bar{E}(\omega)$. En esta figura vemos claramente que para cualquier frecuencia $\omega > \omega_c$, resulta que $\bar{E} < E_1$, lo que contradice (I.26). Luego a la temperatura dada T los osciladores de frecuencia $\omega > \omega_c$ no pueden excitarse. Asimismo, esto queda claro por el hecho de que $E_1 = \hbar\omega$ representa la mínima energía posible de los osciladores de Planck; como ésta no puede exceder la energía media, la frecuencia de los osciladores que se pueden excitar no excede a su vez el valor $\omega_c = \bar{E}(\omega)/\hbar$. En breve, ω_c es una frecuencia de corte para los osciladores.

La frecuencia de corte ω_c se determina de la condición $\bar{E}(\omega_c) = E_1(\omega_c)$; usando (I.26), esto se escribe como

$$\frac{\hbar\omega_c}{e^{\hbar\omega_c/k_BT} - 1} = \hbar\omega_c, \tag{I.27}$$

de donde sigue que

$$\omega_c = \frac{k_BT}{\hbar} \ln 2. \tag{I.28}$$

Este resultado muestra que la frecuencia de corte ω_c crece linealmente con la temperatura absoluta del cuerpo.

I.5 Hay evidencia de que el universo emite radiación de cuerpo negro correspondiente a una temperatura de equilibrio cercana a 3 K. Calcule la energía de un cuanto de luz de longitud de onda λ_m (problema I.3) a esta temperatura, y a 300 K (temperatura ambiente).

Como se vio en el problema I.3, la longitud de onda a la cual la curva espectral de la radiación de fondo del universo tiene su máximo es de aproximadamente

1 mm.[6] La energía de un cuanto de esta longitud de onda es

$$E = hc/\lambda_m = 2.057 \times 10^{-22}\text{J} = 1.284 \times 10^{-9}\ \text{MeV}. \tag{I.29}$$

En cambio, con $T = 300$ K en la ecuación (I.22) se obtiene

$$\lambda_m = 9.66 \times 10^{-6}\ \text{m} = 9660\ \text{nm}, \tag{I.30}$$

que se encuentra en la zona del infrarrojo lejano. Un cuanto de esta longitud de onda tiene una energía 100 veces mayor que el anterior:

$$E = 2.057 \times 10^{-20}\text{J} = 1.284 \times 10^{-7}\ \text{MeV}.$$

I.6 Calcule la energía de un cuanto de luz visible de longitud de onda de 6000 Å. Calcule el número de cuantos de esta longitud de onda que emite por segundo una fuente de 100 watts.

La energía de un cuanto de luz está dada por

$$E = h\nu = hc/\lambda. \tag{I.31}$$

Sustituyendo los valores $hc = 1.988 \times 10^{-25}$ J·m y $\lambda = 6 \times 10^{-7}$ m, se obtiene

$$E = 3.313 \times 10^{-19}\ \text{J} = 2.07\ \text{eV}.$$

Como la potencia de la lámpara es de 100 watts, radia 100 J por segundo (suponiendo que toda la energía se transforma en radiación de la misma longitud de onda, que juega aquí el papel de una longitud de onda promedio) y el número de cuantos por segundo es

$$N = \frac{\text{potencia}}{\text{energía de un cuanto}} = \frac{100\ \text{J}\ \cdot \text{s}^{-1}}{3.313 \times 10^{-19}\ \text{J}},$$

o sea

$$N = 3.018 \times 10^{20}\ \text{s}^{-1}. \tag{I.32}$$

Para la luz en esta región del espectro, el umbral de detección del ojo humano es del orden de cien cuantos por segundo, lo que según el cálculo anterior corresponde a una potencia como de 3.3×10^{-17} W.

I.7 Luz ultravioleta de longitud de onda $\lambda = 3500$ Å incide sobre una superficie de potasio; se observa que la energía máxima de los fotoelectrones emitidos es de 1.6 eV. Calcule la función de trabajo del potasio, despreciando correcciones térmicas.

En una versión simplificada del efecto fotoeléctrico un fotón es absorbido completamente por un electrón de la superficie metálica, de tal manera que cuando se emite un electrón desde la superficie del metal, su energía cinética es (ecuación (T1.17))

$$K = h\nu - W, \tag{I.33}$$

donde W es el trabajo necesario para sacar al electrón del metal, o sea el trabajo necesario para superar tanto los campos atractivos de los átomos en la superficie,

[6] Sobre esta radiación cósmica de fondo puede encontrarse una amplia literatura. Por ejemplo, una discusión muy amena del tema se presenta en S. Weinberg, *The First Three Minutes* (Basic Books, Nueva York, 1988).

como las pérdidas de energía cinética del electrón debidas a sus colisiones con los átomos de la placa en su trayecto a la superficie.

En el caso en que el electrón reciba *toda* la energía absorbida por el átomo y las pérdidas por colisión sean despreciables, el fotoelectrón emergerá con la energía cinética máxima $K_{\text{máx}} = h\nu - W_0$, donde W_0 es la función trabajo del metal, que representa la energía mínima necesaria para que un fotoelectrón llegue a la superficie del metal y escape de las fuerzas que normalmente lo tenían sujeto a éste. Vemos que la función de trabajo puede determinarse como

$$W_0 = h\nu - K_{\text{máx}}. \tag{I.34}$$

Para la luz de longitud de onda $\lambda = 3500$ Å$= 3.5 \times 10^{-7}$ m, la frecuencia es $\nu = c/\lambda = 8.571 \times 10^{14}$ s^{-1}. De aquí resulta para la función de trabajo del potasio

$$\begin{aligned} W_0 &= 6.626 \times 10^{-34} \times 8.571 \times 10^{14} - 1.6 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ J} \\ &= 3.116 \times 10^{-19} \text{ J} = 1.945 \text{ eV}. \end{aligned} \tag{I.35}$$

De este resultado sigue que la longitud de onda umbral (o de corte) del potasio es

$$\lambda_0 = \frac{hc}{W_0} = 6.379 \times 10^{-7} \text{ m} = 637.9 \text{ nm} = 6379 \text{ Å}. \tag{I.36}$$

I.8 Un fotón de 100 MeV choca con un protón en reposo. Calcule la pérdida máxima de energía del fotón.

Cuando se produce efecto Compton, el cambio en la longitud de onda del fotón dispersado está dado por la ecuación (T1.36),

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} \left(1 - \cos\theta\right). \tag{I.37}$$

Dado que para un fotón

$$\lambda = \frac{hc}{E}, \tag{I.38}$$

la expresión (I.37) puede ser reescrita en la forma

$$\frac{E_0 - E}{E E_0} = \frac{1}{m_0 c^2} \left(1 - \cos\theta\right). \tag{I.39}$$

Si definimos la energía perdida por el fotón como $\Delta E = E_0 - E$, tenemos

$$\Delta E = \frac{\left(1 - \cos\theta\right) E_0^2}{m_0 c^2 + \left(1 - \cos\theta\right) E_0}, \tag{I.40}$$

que es una expresión para la energía perdida por el fotón por efecto Compton, en términos de su energía inicial y del ángulo con que es dispersado.

La fórmula anterior permite determinar la pérdida máxima de energía del fotón como función de θ. Para esto basta encontrar los valores de θ para los cuales

$$\frac{d\Delta E}{d\theta} = \frac{E_0^2 m_0 c^2 \operatorname{sen}\theta}{\left[m_0 c^2 + \left(1 - \cos\theta\right) E_0\right]^2} = 0. \tag{I.41}$$

Esta expresión se anula en $\theta = 0$ y $\theta = \pi$. Para $\theta = 0$ se tiene $\Delta E = 0$, con lo cual es claro que no se trata de un máximo de energía perdida. Por otro lado,

es simple mostrar que la segunda derivada de ΔE con respecto a θ evaluada en $\theta = \pi$ toma un valor negativo, lo que corresponde efectivamente a un máximo de energía perdida. Así pues, la pérdida máxima de energía del fotón es

$$\Delta E_{\text{máx}} = \frac{2E_0^2}{m_0c^2 + 2E_0}. \tag{I.42}$$

Esta expresión se puede escribir en la forma alterna adimensional

$$\frac{\Delta E_{\text{máx}}}{E_0} = \frac{1}{1 + (m_0c^2/2E_0)}, \tag{I.43}$$

que muestra que la máxima pérdida de energía por parte del fotón ocurre cuando su energía inicial es muy superior a la energía asociada a la masa en reposo de la partícula involucrada.

Para un fotón con energía inicial $E_0 = 100$ MeV que choca con un protón de masa en reposo $m_0 = 1.67 \times 10^{-27}$ kg (que corresponde a 938 MeV), (I.42) arroja el resultado

$$\Delta E_{\text{máx}} = \frac{2 \times 10^4}{938 + 200} \text{ MeV} = 17.6 \text{ MeV}. \tag{I.44}$$

Si el choque fuera con un electrón libre (cuya masa en reposo es aproximadamente igual a 0.51 MeV), el fotón podría llegar a perder prácticamente toda su energía (véase el siguiente problema):

$$\Delta E_{\text{máx}} \simeq \frac{2 \times 10^4}{0.5 + 200} \text{ MeV} = 99.75 \text{ MeV}. \tag{I.45}$$

I.9 Un fotón de 100 MeV choca con un electrón en reposo y es dispersado a 45° respecto a la dirección de incidencia. Calcule la energía de cada partícula después de la colisión y determine la dirección de salida del electrón.

Dado que se nos pide más información que en el problema anterior, es oportuno hacer un desarrollo más detallado del procedimiento para obtener la fórmula de Compton, partiendo de la condición de que tanto la energía total como el momento lineal se conservan en la colisión.

Antes de que la colisión ocurra, la energía del fotón es $E_0 = 100$ MeV, en tanto que el electrón sólo tiene su energía de reposo m_ec^2. Como resultado de la colisión (mostrada esquemáticamente en la figura I.2), el fotón es dispersado a 45° con respecto a la dirección de incidencia, su energía es E_1 y su momento es p_1. Por otro lado, el electrón adquiere energía cinética K y momento p, y es dispersado a un ángulo φ con respecto a la dirección de incidencia del fotón. Planteemos la conservación del momento lineal. En la figura I.2 observamos que a lo largo del eje x se tiene

$$p_0 = p_1 \cos\theta + p \cos\varphi, \tag{I.46}$$

mientras que a lo largo del eje y

$$0 = p_1 \operatorname{sen}\theta - p \operatorname{sen}\varphi. \tag{I.47}$$

De estas dos expresiones sigue

$$p^2 = p_0^2 - 2p_0p_1 \cos\theta + p_1^2. \tag{I.48}$$

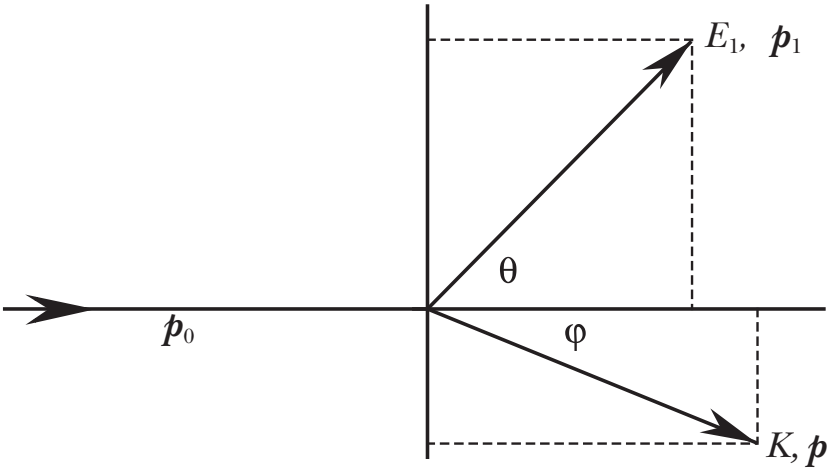


FIGURA I.2 *Dispersión Compton de un fotón por un electrón.*

Por otro lado, la ley de conservación de la energía total conduce a

$$E_0 + m_e c^2 = E_1 + K + m_e c^2, \tag{I.49}$$

o sea

$$E_0 = E_1 + K. \tag{I.50}$$

Como la masa del fotón es cero, su energía y momento están relacionados a través de la expresión $p = E/c$, lo que permite escribir $E_0 = p_0 c$ y $E_1 = p_1 c$, y

$$K = c\,(p_0 - p_1)\,. \tag{I.51}$$

Por otra parte, hemos escrito la energía total del electrón después de la colisión como

$$E = K + m_e c^2, \tag{I.52}$$

pero en términos de su momento es

$$E^2 = m_e^2 c^4 + p^2 c^2. \tag{I.53}$$

De estas dos últimas expresiones tenemos

$$K^2 + 2m_e c^2 K + m_e^2 c^4 = m_e^2 c^4 + p^2 c^2,$$

que se reduce a

$$p^2 = \frac{K^2}{c^2} + 2m_e K. \tag{I.54}$$

Insertando este resultado en (I.48) se tiene

$$\frac{K^2}{c^2} + 2m_e K = p_0^2 - 2p_0 p_1 \cos\theta + p_1^2 \tag{I.55}$$

y sustituyendo (I.51) en esta última expresión resulta

$$2m_e c\,(p_0 - p_1) = 2p_1 p_0\,(1 - \cos\theta)\,. \tag{I.56}$$

De aquí sigue

$$\frac{1}{p_1} - \frac{1}{p_0} = \frac{1}{m_e c}\,(1 - \cos\theta)\,, \tag{I.57}$$

que expresado en términos de la longitud de onda de de Broglie corresponde a la expresión de Compton:

$$\Delta\lambda = \lambda_1 - \lambda_0 = \lambda_c\,(1 - \cos\theta)\,, \tag{I.58}$$

donde

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} \tag{I.59}$$

es la *longitud de onda de Compton*, cuyo valor para el electrón es

$$\lambda_c = 2.43 \times 10^{-12}\ \mathrm{m} = 0.0243\text{Å}. \tag{I.60}$$

De la ecuación (I.57) obtenemos también

$$p_1 = \frac{1}{\dfrac{1}{p_0} + \dfrac{1 - \cos\theta}{m_e c}}. \tag{I.61}$$

Para $E_0 = 100$ MeV$= 1.602 \times 10^{-11}$ J se tiene

$$p_0 = E_0/c = 5.344 \times 10^{-20}\ \mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}},$$

y con los valores $m_e = 9.109 \times 10^{-31}$kg y $\theta = 45°$ obtenemos para el momento lineal del fotón después de la colisión:

$$p_1 = 9.164 \times 10^{-22}\ \mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}},$$

que corresponde a la energía

$$E_1 = cp_1 = 2.747 \times 10^{-13}\ \mathrm{J} = 1.715\ \mathrm{MeV},$$

valor que apenas excede el 1 % de E_0; en otras palabras, el fotón transfiere más del 98 % de su energía al electrón durante esta colisión.

La energía cinética del electrón después de la colisión es la diferencia $E_0 - E_1$,

$$K = 1.575 \times 10^{-11}\ \mathrm{J} = 98.29\ \mathrm{MeV};$$

de (I.54) sigue que el momento correspondiente es

$$\begin{aligned} p &= \frac{K}{c}\sqrt{1 + \frac{2m_e c^2}{K}} = \frac{1.575}{3}\left(1 + 1.04 \times 10^{-2}\right)^{1/2} \times 10^{-19} \\ &= 5.28 \times 10^{-20}\ \mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}}. \end{aligned}$$

Conocidos p_1 y p y utilizando la ley de conservación del momento a lo largo del eje y, podemos escribir

$$\operatorname{sen}\varphi = \frac{p_1}{p}\operatorname{sen}\theta. \tag{I.62}$$

Por lo tanto, la dirección de salida del electrón está dada por $\varphi \simeq \operatorname{sen}\theta/100$, o sea aproximadamente 0.70°.

I.10 Un núcleo de nitrógeno en reposo ($M_0 \simeq 14m_p$) emite un fotón de 6.2 MeV. Determine la energía de retroceso del núcleo.

Antes de la emisión del fotón la energía total y el momento total del sistema están dados por

$$E_i = M_0c^2, \quad p_i = 0. \tag{I.63}$$

Después de la emisión del fotón tendremos los siguientes valores:

$$E_f = M_0'c^2 + K + h\nu, \quad p_f = p_{\text{núcleo}} + \frac{h\nu}{c}, \tag{I.64}$$

en donde $h\nu$ es la energía del fotón emitido, K es la energía de retroceso del núcleo y M_0' es la masa en reposo del núcleo remanente después de la emisión del fotón. Al escribir la última expresión se tomó en cuenta que los movimientos son colineales. De la conservación del momento y de la energía total sigue

$$p_{\text{núcleo}} + \frac{h\nu}{c} = 0 \tag{I.65}$$

y

$$M_0'c^2 + K + h\nu = M_0c^2. \tag{I.66}$$

Observando que

$$M_0'c^2 + K = \sqrt{p_{\text{núcleo}}^2c^2 + M_0'^2c^4}, \tag{I.67}$$

podemos escribir

$$M_0' = \frac{(h\nu)^2 - K^2}{2Kc^2}, \tag{I.68}$$

que substituido en la ecuación (I.66) nos permite despejar la energía cinética, para obtener (el signo se determina considerando que para $\nu = 0$, K debe ser nula)

$$K = M_0c^2 - h\nu - \sqrt{(M_0c^2 - h\nu)^2 - (h\nu)^2}. \tag{I.69}$$

En el presente caso $M_0c^2 = 1.313 \times 10^4$ MeV $\gg h\nu = 6.2$ MeV, por lo que la energía de retroceso del núcleo resulta despreciable y puede considerarse que el núcleo permanece en reposo prácticamente. En efecto, desarrollando hasta segundo orden se obtiene:

$$K \simeq \frac{(h\nu)^2}{2M_0c^2} \simeq 1.464 \times 10^{-3} \text{ MeV}. \tag{I.70}$$

Si $h\nu$ fuese suficientemente mayor, el valor de K podría llegar a ser apreciable.

I.11 Demuestre que según la física clásica, una carga libre puede dispersar un fotón, pero no absorberlo.

Inicialmente se tiene una partícula libre con masa en reposo m_0 y un fotón con energía $E_0 = h\nu$ que se propaga en una dirección fija hacia la partícula libre. Suponiendo que la partícula absorbe el fotón, la situación final correspondería a la partícula con energía E_f y momento p_f; suponiendo también que la energía total se conservara en tal proceso, deberá cumplirse que

$$h\nu + m_0c^2 = E_f. \tag{I.71}$$

Como por otro lado

$$p_f^2 = \frac{E_f^2}{c^2} - m_0^2 c^2, \tag{I.72}$$

eliminando E_f entre ambas expresiones queda

$$p_f^2 = \frac{(h\nu)^2}{c^2} + 2h\nu m_0. \tag{I.73}$$

Sin embargo, como antes de la colisión el momento lineal del sistema es $p_i = h\nu/c$, es posible reescribir la expresión anterior en la forma

$$p_f^2 = p_i^2 + 2h\nu m_0 > p_i^2, \tag{I.74}$$

lo que viola la ley de conservación del momento lineal. Esto significa que el proceso descrito *no* se realiza en la naturaleza para ninguna frecuencia ν del fotón. En otras palabras, mientras que la *absorción* no puede garantizar la conservación simultánea del momento y la energía, la *dispersión* sí lo hace, pues en este caso el momento lineal se distribuye entre los dos sistemas finales.

Las consideraciones anteriores no se aplican al caso del efecto fotoeléctrico, pues los electrones que absorben el fotón no están libres, sino ligados, y el átomo (o la red cristalina) se queda con la diferencia de momento. Por otro lado, en el efecto Compton la colisión se da entre un fotón y un electrón en reposo (que puede tomarse como esencialmente libre), como se supuso en el cálculo anterior; sin embargo, en este caso el fotón no cede toda su energía al electrón, sino sólo una parte de ella.

I.12 Suponiendo aplicables (en lo concerniente) las leyes clásicas, calcule la potencia radiada por un electrón que se mueve en una órbita circular de Bohr caracterizada por el número cuántico n.

En física clásica, para que el electrón pudiera describir una órbita circular sería necesario que una fuente externa compensara continuamente la energía perdida por radiación. Esto es debido a que en la teoría electromagnética las cargas aceleradas radian energía en forma de ondas electromagnéticas; específicamente, en el límite no relativista la potencia radiada por una carga eléctrica sujeta a la aceleración a está dada por la *fórmula de Larmor*[7]

$$P = \frac{2}{3}\frac{e^2 a^2}{4\pi\varepsilon_0 c^3}. \tag{I.75}$$

Olvidémonos por un momento de la estabilidad de las órbitas de Bohr y calculemos con métodos clásicos la potencia radiada por un electrón que se mueve en una órbita circular de Bohr caracterizada por el número cuántico n. Consideremos un átomo constituido por un núcleo de carga Ze y masa M y un solo electrón de carga $-e$ y masa m. Como la masa del electrón es muy pequeña en comparación con la del núcleo, consideramos a este último como fijo en el espacio. Las órbitas estables de la teoría de Bohr pueden determinarse igualando la fuerza inercial centrífuga y la atracción coulombiana ejercida sobre el electrón por el núcleo:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}. \tag{I.76}$$

[7] Jackson (1975), p. 659.

Para una órbita circular, el momento angular del electrón es

$$L = mvr \tag{I.77}$$

y aplicando el segundo postulado de Bohr (o la regla de Wilson-Sommerfeld a $J_\theta = L$) se obtiene

$$mvr = n\hbar, \tag{I.78}$$

con lo que la velocidad orbital resulta

$$v = \frac{n\hbar}{mr}. \tag{I.79}$$

Sustituyendo en (I.76) y despejando el radio de la órbita, queda

$$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{mZe^2}n^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{I.80}$$

Vemos que la condición de cuantización del momento angular restringe las órbitas circulares posibles a aquellas cuyos radios satisfacen la ecuación (I.80). Usando (I.78), la velocidad del electrón resulta

$$v_n = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{n\hbar}, \tag{I.81}$$

mientras que la aceleración, $a = v^2/r$, viene dada por

$$a_n = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^3}\frac{mZ^3e^6}{n^4\hbar^4}. \tag{I.82}$$

Sustituyendo esta expresión en la fórmula de Larmor (I.75), se obtiene finalmente:

$$P = \frac{2}{3}\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^7}\frac{Z^6e^{14}m^2}{c^3\hbar^8n^8}. \tag{I.83}$$

Por ejemplo, para un electrón en la primera órbita permitida de un átomo de hidrógeno ($Z = 1, n = 1$) se obtiene

$$P = 2.9 \times 10^{10}\ \text{eV/s} = 2.9 \times 10^4\ \text{MeV/s}.$$

Esta tasa de pérdida de energía es muy alta (como referencia, recuérdese que la masa del electrón en reposo equivale a poco más de 0.5 MeV). Peor aún, se trata tan sólo de la tasa inicial, pues debido a la radiación el radio de la órbita iría decreciendo, con lo cual aumentaría el valor de P y el electrón perdería energía cada vez más rápidamente, cayendo en espiral hacia el núcleo. Concluimos que si no se impusiera el postulado de estabilidad de Bohr, que establece que un electrón en una órbita permitida *no radía*, un átomo de hidrógeno tomaría sólo alrededor de 10^{-10} segundos en colapsarse, lo cual obviamente no sucede.

I.13 Estudie las órbitas elípticas en el modelo de Bohr.

El hamiltoniano de un átomo hidrogenoide con Z protones en su núcleo es, en coordenadas esféricas (véase sección 1.7 del texto o Goldstein (1980); ponemos $\kappa = {}^1\!/_{4\pi\varepsilon_0}$),

$$H = E = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\phi^2}{2mr^2} - \kappa\frac{Ze_0^2}{r}, \tag{I.84}$$

donde

$$p_r = m\,\dot{r}, \quad p_\phi = mr^2\,\dot{\phi} = L = \text{cte} \tag{I.85}$$

son los correspondientes momentos generalizados. Las reglas de cuantización de Wilson-Sommerfeld aplicadas a estos momentos dan

$$\oint p_\phi d\phi = 2\pi L = n_\phi h, \quad n_\phi = 1, 2, 3, \ldots \tag{I.86}$$

y

$$\oint p_r dr = n_r h, \quad n_r = 1, 2, 3, \ldots \tag{I.87}$$

Utilizando las ecuaciones (I.84) y (I.85) podemos escribir

$$p_r = \sqrt{2m\left(E - \frac{L^2}{2mr^2} + \frac{Z\kappa e_0^2}{r}\right)}, \tag{I.88}$$

con lo que la ecuación (I.87) se reduce al cálculo de la integral

$$\sqrt{2m}\oint \sqrt{E - \frac{L^2}{2mr^2} + \frac{Z\kappa e_0^2}{r}}dr = n_r h. \tag{I.89}$$

La integral requerida se estudia en la mayoría de los libros de variable compleja[8] y en textos intermedios de mecánica, como Goldstein (1980), pp. 473–475; su valor es

$$\oint \sqrt{A + \frac{2B}{r} - \frac{C}{r^2}}dr = 2\pi i\left(\sqrt{-C} + \frac{B}{\sqrt{A}}\right). \tag{I.90}$$

Aplicando esta fórmula al presente caso, queda

$$n_r h = \sqrt{2m}2\pi i\left(\sqrt{-\frac{L^2}{2m}} + \frac{Z\kappa e_0^2}{2\sqrt{E}}\right), \tag{I.91}$$

donde L está dada por la ecuación (I.86). De aquí podemos despejar el valor de la energía para obtener la regla de cuantización

$$E = -\kappa^2\frac{Z^2 e_0^4 m}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{I.92}$$

donde $n = n_r + n_\phi$ es el *número cuántico principal*. Obsérvese que la energía de las órbitas cerradas resulta negativa y que existe *degeneración*, pues el valor de n (que determina la energía del sistema) puede obtenerse con diferentes combinaciones de valores de n_r y n_ϕ.

Por otro lado, en un problema de fuerza central como el presente, la ecuación de las órbitas está determinada por la ecuación diferencial[9]

$$\frac{d^2u}{d\phi^2} + u = -\frac{mf\,(1/u)}{L^2u^2}, \tag{I.93}$$

en donde $u = 1/r$ y $f = -dV/dr$. La solución para el problema de Kepler es

$$\frac{1}{r} = \frac{\kappa Z e_0^2 m}{L^2}\left(1 + \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{\kappa^2 Z^2 e_0^4 m}}\cos\left(\theta - \theta'\right)\right), \tag{I.94}$$

[8] Vease por ejemplo Marsden (1975).
[9] Goldstein (1980), cap 3.

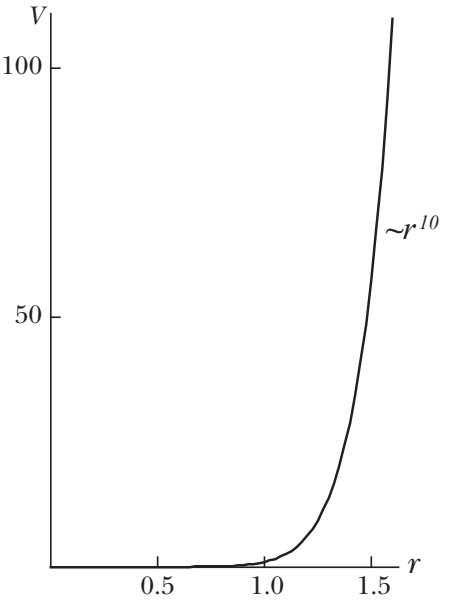


FIGURA I.3 *Forma general del potencial V(r); se ilustra el caso k=10.*

con θ' una constante a determinar a partir de las condiciones iniciales. Esta ecuación tiene la forma general de una cónica con un foco en el origen:

$$\frac{1}{r} = C\left[1 + e\cos\left(\theta - \theta'\right)\right], \tag{I.95}$$

donde e es la excentricidad de la sección cónica. Como $E < 0$, la excentricidad es menor que la unidad, lo que significa que las órbitas permitidas son elipses.

I.14 Utilice las reglas de cuantización de Wilson-Sommerfeld para determinar los niveles de energía y el espectro de emisión de una partícula que se mueve en el potencial $V(r) = V_0 (r/a)^k$ con $k \gg 1$, suponiendo que es posible restringirse al estudio de órbitas circulares. Dibuje una gráfica representativa de este potencial y compare los resultados con los del problema ilustrativo 1.1 del texto.

La forma general de $V(r)$ se ilustra en la figura I.3 (para $k = 10$). El hamiltoniano en coordenadas polares para una partícula sujeta a este potencial es

$$H = E = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\phi^2}{2mr^2} + V_0\left(\frac{r}{a}\right)^k, \tag{I.96}$$

con

$$p_r = m\,\dot{r}, \quad p_\phi = mr^2\,\dot{\phi} = L = \text{const} \tag{I.97}$$

y

$$\dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\phi^2}{mr^3} - k\frac{V_0}{a}\left(\frac{r}{a}\right)^{k-1}. \tag{I.98}$$

Al igual que en la sección 1.7 del texto, consideraremos sólo las órbitas circulares, por lo que tomamos $\dot{r} = 0$, $p_r = 0$ y $\dot{p}_r = 0$. Esta restricción no está del todo justificada, pues para k arbitraria en el correspondiente problema clásico ligado

todas las órbitas son abiertas[10]; con tal selección el problema adquiere, por tanto, un carácter básicamente académico. Aplicamos las reglas de cuantización de Wilson-Sommerfeld, las ecuaciones (I.86) y (I.87) y sustituimos en el hamiltoniano anterior, lo que da

$$E = \frac{(n_\phi \hbar)^2}{2mr^2} + V_0 \left(\frac{r}{a}\right)^k . \tag{I.99}$$

Como de la ecuación (I.98) con $\dot{p}_r = 0$ sigue que

$$L^2 = p_\phi^2 = n_\phi^2 \hbar^2 = k \frac{mV_0}{a^k} r^{k+2}, \tag{I.100}$$

el radio de las órbitas permitidas queda dado por

$$r_n = \left(\frac{n^2 \hbar^2 a^k}{kmV_0}\right)^{1/(k+2)}, \quad n \equiv n_\phi. \tag{I.101}$$

Hemos escrito $n = n_\phi$ por no haber riesgo de confusión, pues sólo aparece un número cuántico en el presente problema. La ecuación (I.99) determina ahora la regla de cuantización para los niveles de energía:

$$E_n = V_0 \left(\frac{r_n}{a}\right)^k \left(\frac{k}{2} + 1\right) \tag{I.102}$$

o bien, de manera explícita,

$$E_n = \left(\frac{k}{2} + 1\right) V_0 \left(\frac{n^2 \hbar^2}{kmV_0 a^2}\right)^{\frac{k}{k+2}}, \quad k > 0. \tag{I.103}$$

De este resultado y la regla de Bohr sigue que el espectro de emisión está dado por

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = \left(\frac{k}{2} + 1\right) \frac{V_0}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{kmV_0 a^2}\right)^{\frac{k}{k+2}} \left(n^{\frac{2k}{k+2}} - n'^{\frac{2k}{k+2}}\right). \tag{I.104}$$

Para $k \gg 1$ las expresiones anteriores se simplifican considerablemente:

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad \omega_{nn'} = \frac{\hbar}{2ma^2} \left(n^2 - n'^2\right). \tag{I.105}$$

Estos resultados son similares a los que se aplican a un rotor rígido con momento de inercia $I = ma^2$, como el estudiado en el problema ilustrativo 1.3 del texto. Esto significa que el potencial $V = V_0 (r/a)^k$ con $k \gg 1$ puede tomarse como una aproximación razonable a la constricción que mantiene la rigidez del rotor, como sugiere el comportamiento mostrado en la figura I.3, considerando el caso $k \to \infty$. De la ecuación (I.101) vemos que

$$\frac{r}{a} \simeq \left(\frac{L^2}{kma^2 V_0}\right)^{1/k} \underset{k\to\infty}{\to} 1, \tag{I.106}$$

lo que verifica que para $k \gg 1$ es posible tomar la cantidad a como el radio del sistema para $L \neq 0$.

[10]El teorema de Bertrand (1873) establece que las únicas fuerzas centrales que dan lugar a órbitas cerradas para todos los problemas clásicos ligados son las proporcionales a r (ley de Hooke) o a r^{-2} (ley de la gravitación). Una discusión elemental de estos tópicos puede verse en Goldstein (1980), capítulo 3.

I.15 Suponga que la fuerza de interacción entre un electrón y un protón fuera inversamente proporcional a $r^{3/2}$. Determine cuál sería en tal caso el espectro energético del átomo, usando las reglas de cuantización de Wilson y Sommerfeld.

Este problema es similar al anterior y se aplican a él las mismas consideraciones, con la diferencia importante de que debe tomarse $E < 0$; el pozo está formado por la combinación del potencial atractivo con $V_0 < 0$ y el debido a la barrera centrífuga. Poniendo $k = -1/2$ y limitándonos a las órbitas circulares de (I.103), sigue

$$E_n = -\frac{3}{4}\left(\frac{m\,|V_0|^4\,a^2}{2\hbar^2 n^2}\right)^{1/3}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{I.107}$$

El espectro de emisión resulta

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = \frac{|E_1|}{\hbar}\left(\frac{1}{n'^{2/3}} - \frac{1}{n^{2/3}}\right). \tag{I.108}$$

I.2. Problemas adicionales

I.16 Calcule la razón entre la energía emitida por un cuerpo negro a temperatura $T = 2000$ K contenida en una banda de anchura 100 Å centrada en $\lambda_1 = 5000$ Å (luz visible), y la energía emitida en una banda de la misma anchura, pero centrada en $\lambda_2 = 50000$ Å, es decir, en el infrarrojo lejano.

Tomando $\Delta\lambda = 50$ Å, se tiene, a temperatura constante,

$$W \equiv \frac{\Delta u_{\lambda_2}}{\Delta u_{\lambda_1}} = \frac{\int_{\lambda_2-\Delta\lambda}^{\lambda_2+\Delta\lambda}\left|\frac{d\rho_T(\lambda)}{d\lambda}\right| d\lambda}{\int_{\lambda_1-\Delta\lambda}^{\lambda_1+\Delta\lambda}\left|\frac{d\rho_T(\lambda)}{d\lambda}\right| d\lambda} \simeq \frac{\left|\frac{d\rho_T(\lambda)}{d\lambda}\right|_{\lambda=\lambda_2}}{\left|\frac{d\rho_T(\lambda)}{d\lambda}\right|_{\lambda=\lambda_1}}. \tag{I.109}$$

La última igualdad resulta de considerar la función $|d\rho_T(\lambda)/d\lambda|$ como prácticamente constante en cada rango de interés de anchura $2\Delta\lambda$. Como para la distribución de equilibrio se tiene

$$\left|\frac{d\rho_T(\lambda)}{d\lambda}\right| = \frac{d\rho_T(\omega)}{d\omega}\left|\frac{d\omega}{d\lambda}\right| = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{e^{hc/k_BT\lambda} - 1}, \tag{I.110}$$

queda

$$W = \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^5\left[\frac{\exp(hc/k_BT\lambda_1) - 1}{\exp(hc/k_BT\lambda_2) - 1}\right]. \tag{I.111}$$

Sustituyendo en esta última expresión $k_B = 8.62 \times 10^{-5}\text{eV}\cdot\text{K}^{-1}$, $T = 2000$ K se obtiene

$$W = 5.50.$$

Este resultado muestra que sólo una fracción pequeña de la energía es emitida en el visible.

I.17 En los estudios sobre el efecto fotoeléctrico, cuando $v/c > 0.1$, debe utilizarse la expresión relativista para la energía cinética del electrón, si se desea evitar que los errores excedan el 1 %. Para los fotoelectrones liberados de una superficie de aluminio, ¿cuál es la longitud de onda más pequeña de la radiación incidente para la que puede utilizarse la mecánica clásica? La función de trabajo del aluminio es $W_0^{(\text{Al})} = 4.2$ eV.

La energía cinética máxima con la que un fotoelectrón puede ser liberado de una superficie metálica está dada por la expresión (I.34), o sea

$$K_{\text{máx}} = h\nu - W_0, \tag{I.112}$$

con ν la frecuencia de la radiación incidente y W_0 la función trabajo del metal. Si queremos que el valor máximo de la energía del fotoelectrón sea

$$K_{\text{máx}} = \tfrac{1}{2} m_e \,(0.1c)^2\,, \tag{I.113}$$

de tal manera que pueda aplicarse aún la mecánica clásica, la longitud de onda debe ser mayor que

$$\lambda_{\text{mín}} = \frac{c}{\nu_{\text{máx}}} = \frac{hc}{\frac{0.01}{2} m_e c^2 + W_0}. \tag{I.114}$$

Sustituyendo los valores $W_0 = 4.2$ eV, $hc = 1.24 \times 10^{-4}$ eV·cm y $m_e c^2 = 0.511$ MeV, se obtiene

$$\lambda_{\text{mín}} = 4.84\,\text{Å}.$$

I.18 En la dispersión Compton de luz por electrones, el problema se complica por el hecho de que los electrones atómicos no están en reposo. Considere un gas de átomos de hidrógeno que es irradiado con rayos X de longitud de onda $\lambda = 1$ Å. Haga una estimación de la anchura de variación del ángulo de salida de los electrones atómicos expulsados por efecto Compton, suponiendo que los rayos X se retrodispersan exactamente.

Para hacer esta estimación, supondremos, para empezar, que el momento inicial del electrón p_0 es perpendicular a la trayectoria de los rayos X; la magnitud de este momento está dada aproximadamente por $p_0 a \sim \hbar$, con a el radio de la primera órbita de Bohr. Por efecto de la colisión el electrón adquiere un momento longitudinal p_e, que se obtiene de la ley de conservación del momento:

$$\frac{\hbar}{c}\,|\Delta\omega| = p_e \tag{I.115}$$

y $\Delta\omega$ se obtiene de la fórmula de Compton

$$\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta), \tag{I.116}$$

con $\lambda = 2\pi c/\omega$ y $\lambda_c = 2.4 \times 10^{-10}$ cm para el electrón. En el presente caso $\theta = \pi$ y, por tanto, $\Delta\lambda = 2\lambda_c$, o sea

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{2\omega}{\omega_c}. \tag{I.117}$$

De aquí sigue que $\Delta\omega \ll \omega$, y de (I.115) queda claro que el electrón liberado es no relativista.

Como los electrones pueden tener un momento inicial cualquiera entre 0 y p_0 en la dirección transversal, el ángulo de dispersión puede quedar comprendido entre $\varphi = 0$ y $\varphi = \tan^{-1}(p_0/p_e)$ hacia ambos lados. Con $p_0 \sim \hbar/a$ y p_e dada por (I.115) y (I.117),

$$p_e = \frac{2\hbar\omega^2}{\omega_c c} = \frac{4\pi\hbar\lambda_c}{\lambda^2}, \tag{I.118}$$

se obtiene después de sustituir valores numéricos:

$$\Delta\varphi = 2\arctan(\lambda^2/4\pi a\lambda_c) = 2\arctan(0.14), \tag{I.119}$$

o sea $\Delta\varphi \simeq 20°$.

I.19 Aplique el principio de correspondencia a la radiación emitida por un átomo de Bohr.

La frecuencia de revolución ν del electrón en una órbita de Bohr circular está dada por

$$\nu = \frac{v}{2\pi r}. \tag{I.120}$$

Sustituyendo las expresiones para v y r derivadas en el problema I.12 se obtiene

$$\nu_n = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mZ^2e^4}{2\pi n^3\hbar^3}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{I.121}$$

De acuerdo a la física clásica, la luz emitida en un caso como éste tiene frecuencia fundamental igual a la frecuencia de revolución. Veamos este problema desde la perspectiva del modelo de Bohr.

En el modelo de Bohr la energía del electrón en una órbita circular hidrogenoide está dada por (I.92), o sea (en unidades SI, con $e_0^2 \to e^2/4\pi\varepsilon_0$),

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots, \tag{I.122}$$

y la frecuencia de la luz emitida por el electrón al pasar de una órbita caracterizada por el número cuántico n_i a otra caracterizada por el número cuántico n_f resulta

$$\nu = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mZ^2e^4}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right). \tag{I.123}$$

Con $n = n_i$ el número cuántico inicial y $n_f = n - k$, con $k = 1, 2, 3, \ldots$, el número cuántico final queda

$$\nu = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mZ^2e^4}{4\pi\hbar^3}\left[\frac{1}{(n-k)^2} - \frac{1}{n^2}\right] = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mZ^2e^4}{4\pi\hbar^3}\cdot\frac{2nk - k^2}{n^2\,(n-k)^2}. \tag{I.124}$$

En el caso $n \gg 1$ pero $k \ll n$, que es el que nos interesa, podemos aproximar como sigue:

$$2nk - k^2 \cong 2nk, \quad (n-k)^2 \cong n^2, \tag{I.125}$$

y la expresión para la frecuencia radiada se reduce a

$$\nu = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mZ^2e^4}{4\pi\hbar^3}\cdot\frac{2k}{n^3}. \tag{I.126}$$

Introduciendo la acción $J \equiv n\hbar$, la expresión anterior se escribe en la forma

$$\nu = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mZ^2e^4}{2\pi J^3}k, \tag{I.127}$$

o bien

$$\nu = \nu_J k, \tag{I.128}$$

con k un número entero y ν_J la frecuencia de revolución del electrón en su órbita inicial, dada por (I.121) con $n\hbar = J$. Podemos considerar ahora el límite $\hbar \to 0$ y $n \to \infty$ de manera tal que $J \equiv n\hbar$ permanezca constante. Vemos que, cuando $k = 1$, la frecuencia de la radiación coincide con la frecuencia de revolución ν_J del electrón en su órbita y que sus armónicos corresponden a $k = 2, 3, 4, \ldots$

Concluimos que el modelo de Bohr predice los mismos resultados que la física clásica en el límite de números cuánticos muy grandes. Este hecho fue utilizado por Bohr como parte de los argumentos que lo condujeron a enunciar su *principio de correspondencia*.

I.20 Utilice la regla de cuantización de Wilson-Sommerfeld para calcular los niveles permitidos de energía para una pelotita de masa m que rebota elásticamente en la dirección vertical.

De la expresión para la energía de la pelotita en presencia del campo gravitatorio cerca de la superficie terrestre,

$$E = \frac{p^2}{2M} + Mgz, \tag{I.129}$$

sigue que

$$p = \sqrt{2M\,(E - Mgz)}. \tag{I.130}$$

El movimiento está acotado entre $z = 0$ y $z = E/Mg$. La aplicación de la regla de cuantización $\oint p dz = 2\pi\hbar n$, $n = 0, 1, 2, \ldots$, conduce a

$$2\int_0^{E/Mg} \sqrt{2M(E - Mgz)}\, dz = \sqrt{2M}\frac{4E^{3/2}}{3Mg} = 2\pi\hbar n, \tag{I.131}$$

de donde sigue que

$$E_n = \left(\tfrac{9}{8}\pi^2 M g^2 \hbar^2 n^2\right)^{1/3} = E_1 n^{2/3}. \tag{I.132}$$

Es interesante comparar este resultado con la solución exacta que se obtiene en el problema V.13 y en la sección 10.4 del texto.

* **I.21** Demuestre que las fluctuaciones de la energía de un campo de radiación en equilibrio descrito por la ley de Planck (I.1), están dadas por la suma de un término proporcional a la energía media, más otro que depende cuadráticamente de ella. ¿Qué sucede con estas fluctuaciones cuando se sustituye el postulado del intercambio discreto de energía por la hipótesis clásica de intercambio continuo? *Observaciones*: Este resultado es muy importante históricamente, pues de él partió Einstein para proponer que el campo de radiación de baja intensidad posee una estructura granular, además de sus propiedades ondulatorias. La razón es que, mientras que el término cuadrático se explica naturalmente dentro de la física clásica como debido a las interferencias entre los modos del campo de la frecuencia correspondiente (como lo pone en evidencia la segunda parte del problema), el término lineal es similar al producido por los movimientos caóticos e independientes de las moléculas de un gas ideal, e implica por lo tanto una estructura granular de la radiación.[11]

Procediendo como se hace en la sección 1.5 del texto, suponemos que la energía del campo puede variar sólo por las cantidades discretas $E = E_0 n$, por lo que, poniendo $x = \exp\left(-E_0/k_B T\right)$ escribimos el valor medio de la energía y de su cuadrado en la forma

$$\overline{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_0 n x^n}{\sum_{n=0}^{\infty} x^n}, \tag{I.133}$$

[11] Este punto se discute con un poco más de amplitud en el problema ilustrativo 21.1 del texto.

$$\overline{E^2} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_0^2 n^2 x^n}{\sum_{n=0}^{\infty} x^n}. \tag{I.134}$$

Como

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}, \tag{I.135}$$

derivando respecto de x se obtiene

$$\sum_{n=0}^{\infty} n x^n = \frac{x}{(1-x)^2}, \tag{I.136}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} n^2 x^n = \frac{x(1+x)}{(1-x)^3}. \tag{I.137}$$

Con estos resultados las expresiones anteriores se escriben como sigue:

$$\overline{E} = E_0 \frac{x}{1-x}, \tag{I.138}$$

$$\overline{E^2} = E_0^2 \frac{x(1+x)}{(1-x)^2} = \frac{1+x}{x}\overline{E}^2 = \overline{E}^2 + \frac{1}{x}\overline{E}^2. \tag{I.139}$$

Con ayuda de (I.138) podemos escribir

$$x = e^{-E_0/k_B T} = \frac{\overline{E}}{E_0 + \overline{E}}. \tag{I.140}$$

Sustituyendo este resultado en (I.139), la dispersión de la energía del campo de radiación en equilibrio resulta

$$\sigma_E^2 = \overline{E^2} - \overline{E}^2 = \frac{\overline{E}^2}{x} = \overline{E}\left(E_0 + \overline{E}\right),$$

es decir,

$$\sigma_E^2 = \overline{E}^2 + E_0 \overline{E}, \tag{I.141}$$

que tiene la forma indicada en el enunciado del problema. Debe observarse, sin embargo, que aunque la estructura del resultado es la correcta, la expresión obtenida debe ser revisada, pues la distribución completa de Planck posee un término de energía de punto cero que ha sido omitido en el presente tratamiento. En el análisis que de este tema se hace en el problema ilustrativo 21.1 del texto, se incluye el término de punto cero aquí omitido.

Cuando se supone que el intercambio de energía entre materia y campo es continuo, las expresiones (I.133) y (I.134) deben sustituirse por

$$\overline{E} = \frac{\int_0^{\infty} E e^{-\beta E} dE}{\int_0^{\infty} e^{-\beta E} dE}, \tag{I.142}$$

$$\overline{E^2} = \frac{\int_0^{\infty} E^2 e^{-\beta E} dE}{\int_0^{\infty} e^{-\beta E} dE}, \tag{I.143}$$

en donde hemos introducido por comodidad la temperatura inversa $\beta = 1/k_B T$. Las integrales se realizan fácilmente observando que

$$\int_0^{\infty} e^{-\beta E} dE = \frac{1}{\beta}, \tag{I.144}$$

$$\int_0^\infty Ee^{-\beta E}dE = -\frac{\partial}{\partial\beta}\int_0^\infty e^{-\beta E}dE = \frac{1}{\beta^2}, \tag{I.145}$$

$$\int_0^\infty E^2e^{-\beta E}dE = \frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\int_0^\infty e^{-\beta E}dE = \frac{2}{\beta^3}. \tag{I.146}$$

Se obtiene

$$\overline{E} = \frac{1}{\beta} = k_BT, \tag{I.147}$$

$$\overline{E^2} = \frac{2}{\beta^2} = 2\overline{E}^2. \tag{I.148}$$

De aquí sigue para las fluctuaciones de la energía predichas por la teoría electromagnética (ondulatoria) clásica:

$$\sigma^2_{E\text{clásica}} = \overline{E^2} - \overline{E}^2 = \overline{E}^2. \tag{I.149}$$

Comparando con el resultado predicho por la teoría de Planck, ecuación (I.141), observamos que la teoría clásica pierde el término lineal $E_0\overline{E}$, que corresponde a eventos independientes de naturaleza granular. De acuerdo con la ecuación (T1.34), $E_0 = \hbar\omega$, por lo que la omisión de este término para cada oscilador (para cada frecuencia) equivale a tomar $\hbar = 0$, es decir, a perder la naturaleza cuántica del fenómeno. La verificación de que la contribución cuántica $E_0\overline{E}$ se puede interpretar como debida a una estructura granular subyacente se logra fácilmente considerando que las fluctuaciones de la energía de un gas ideal (constituido por moléculas independientes) están dadas por la expresión

$$\sigma^2_{E\text{gas ideal}} = \text{const}\cdot\overline{E}, \tag{I.150}$$

en donde $\bar{E}(T)$ es la energía media en equilibrio.

I.3. Ejercicios

I.22 Determine la densidad y la energía media de los fotones del campo electromagnético de fondo de 2.7 K del Universo.

I.23 La energía electromagnética media solar que incide sobre la superficie terrestre por unidad de área y de tiempo es de aproximadamente 340 W/m^2 (=0.488 cal/cm^2·min). ¿A qué temperatura tendría que estar la tierra, considerada como un cuerpo negro, para que emitiera esta cantidad de energía?

I.24 Tomando al Sol como un cuerpo negro a 5700 K, determine la fracción de su masa que emite anualmente como radiación electromagnética.

I.25 Un fotón de 6 MeV genera un par electrón-positrón en la cercanía de un núcleo pesado en reposo. Suponiendo que las dos partículas se reparten por igual la energía disponible y que la energía de retroceso del núcleo es la mínima posible, determine la energía cinética y la velocidad de las partículas del par.

I.26 Los rayos X se pueden producir frenando bruscamente sobre una superficie metálica electrones acelerados por un potencial ajustable V (todo en un vacío, naturalmente); éste es el fenómeno de *radiación de frenado* o *Bremsstrahlung*. Determine la frecuencia máxima y la mínima longitud de onda de la radiación X así producida.

I.27 Determine en unidades del SI y en unidades atómicas ($e = m = \hbar = 1$) los valores que el modelo de Bohr arroja para las siguientes cantidades para el estado base del átomo de hidrógeno: radio de la órbita, velocidad lineal, momento lineal, velocidad angular, momento angular, aceleración, fuerza, energía total.

I.28 Considere un "átomo de Bohr" formado por un protón y un electrón, pero ligados por su interacción gravitatoria. Determine el tamaño y la energía de amarre de este sistema.

I.29 Calcule la corrección a la fórmula $\hbar\omega = |E_i - E_f|$ debida al retroceso del átomo durante la absorción o emisión de la radiación.

I.30 El deuterio es un isótopo del hidrógeno cuyo núcleo consta de un protón y un neutrón fuertemente ligados, con peso atómico 2 (las masas del protón y del neutrón son prácticamente iguales). Determine: a) la constante de Rydberg para el deuterio en términos de la del hidrógeno; b) la relación de las longitudes de onda del espectro del deuterio a las de las correspondientes transiciones del hidrógeno.

I.31 El muón es una partícula (un *leptón*) muy similar al electrón, pero con masa 207 veces mayor. Bajo condiciones apropiadas se pueden formar átomos muónicos, en los que un electrón orbital queda sustituido por un muón. Como el muón es inestable, con vida media de aproximadamente 2.2 μs, estos átomos son inestables. Sin embargo, pese a su breve vida, la pequeñez de la órbita más interna (debido a la gran masa del muón) permite probar los efectos del tamaño y la estructura del núcleo atómico, lo que hace a estos sistemas muy útiles.

Determine el radio y la energía de las posibles órbitas muónicas, respecto de las correspondientes cantidades para el hidrógeno. Estimando el radio nuclear como $R = R_0 Z^{1/3}$, con $R_0 \approx 2$ fm (1 fm (fermi) $= 10^{-13}$ cm), determine el valor de Z para el cual el radio del átomo muónico se equipara al del propio núcleo.

II. Propiedades estadísticas y ondulatorias del movimiento de partículas

II.1. Problemas del texto

II.1 Calcule la longitud de onda de de Broglie de una partícula puntual que se mueve con velocidad $c/100$. Considere los siguientes casos: a) un electrón ($m_e = 9.1\times10^{-28}$ g); b) un protón ($m_p = 1836.1 m_e$); c) una pelotita ($m = 10$ g); d) la Tierra ($M_T = 6\times10^{27}$ g). Compare sus resultados con la longitud de onda de la luz visible y con los radios atómicos. (El radio de la primera órbita de Bohr es $a = 0.529\times10^{-8}$ cm.)

La longitud de onda de de Broglie está dada por

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}, \tag{II.1}$$

donde la segunda igualdad vale en el dominio no relativista. Al sustituir aquí la velocidad $v = c/100$, se obtiene para cualquiera de los casos analizados (la masa en kg, la longitud de onda en m):

$$\lambda = \frac{100h}{mc} = \frac{2.21\times10^{-40}}{m}. \tag{II.2}$$

Con $\lambda_v = 6000$ Å$= 6\times10^{-7}$ m como valor representativo de la longitud de onda de la luz visible se tiene:

	m	λ	λ/λ_v	λ/a
a)	9.1×10^{-31} kg	2.43×10^{-10} m	4.05×10^{-4}	4.59
b)	$1836.1\, m_e$	1.32×10^{-13} m	2.20×10^{-7}	2.50×10^{-3}
c)	10^{-2} kg	2.21×10^{-38} m	3.68×10^{-32}	4.18×10^{-28}
d)	6×10^{24} kg	3.68×10^{-65} m	6.14×10^{-59}	6.96×10^{-55}

Observamos que las longitudes de onda de la luz visible son muy grandes comparadas con las longitudes de onda de de Broglie de los objetos estudiados, incluso de un electrón que se mueve a una velocidad del orden de $c/100$ (o aún mayor). Para los objetos más masivos la longitud de onda de de Broglie resulta despreciable aún en comparación con las dimensiones de los núcleos atómicos (que son del orden de 10^{-5} Å$= 10^{-15}$ m $= 1$ fm); para dichos cuerpos no se puede

esperar detectar algún comportamiento ondulatorio asociado a su movimiento. Esto se hace extensivo a los cuerpos pequeños, con tal de que sigan siendo macroscópicos. Por ejemplo, para una partícula de humo de una micra (mejor: un micrómetro[1]) de diámetro y con una masa del orden de 10^{-15} kg moviéndose a una velocidad tan baja como 1 mm/s, resulta $\lambda \sim 6 \times 10^{-6}$ Å, la longitud de onda es de apenas las dimensiones de un núcleo atómico. Sin embargo, para partículas con masa muy pequeña (como un electrón o un nucleón) y velocidades que sean una fracción de la velocidad de la luz, la longitud de onda de de Broglie puede alcanzar valores del orden de las distancias interatómicas, por lo que se observan fenómenos de difracción de tales partículas por cristales, por ejemplo. Esto se aprecia ya en la última columna de la línea a) del electrón de la tabla anterior.

II.2 Considere un ensemble de partículas libres independientes, cuya velocidad media es de 10^5 m/s. El haz incide sobre una placa opaca a las partículas, la cual tiene una ranura de 10^{-8} cm de anchura. Calcule la longitud de onda de de Broglie para los casos a), b) y c) del problema anterior. Considerando a las partículas como puntuales, ¿qué se observaría en cada caso en una placa fotográfica colocada después y lejos de la ranura?

La longitud de onda de de Broglie es (masa en kg)

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6.63 \times 10^{-39}}{m} \text{ m}, \tag{II.3}$$

que da los resultados[2]

	m	λ
$a)$	9.1×10^{-31} kg	7.28×10^{-9} m
$b)$	$1836\, m_e$	3.96×10^{-12} m
$c)$	10^{-2} kg	6.63×10^{-37} m

Se supone que el haz está colimado y las partículas se dirigen perpendicularmente hacia la pantalla. Al cruzar la ranura de ancho $a = 10^{-10}$ m, las partículas del caso a), con $\lambda \sim 70\, a$, formarán una mancha en la placa, de un tamaño mayor que la ranura debido a los efectos de dispersión. En el caso b), con $\lambda \sim 0.04\, a$, la distribución de partículas en la placa presentará efectos de borde apenas perceptibles, en forma de bandas claras y oscuras muy próximas entre sí. En el caso c), con $\lambda \ll a$, se observará un comportamiento puramente corpuscular; la mancha en la placa fotográfica tendrá la forma y el tamaño de la ranura, con bordes bien definidos.

II.3 Encuentre la expresión para la velocidad orbital del electrón de un átomo de hidrógeno que se encuentra en su estado de mínima energía, usando el modelo de Bohr. Como este estado es estacionario, puede ser descrito mediante un ensemble de átomos de hidrógeno en su estado base. Use esta observación para determinar la longitud de onda asociada a la correspondiente velocidad orbital y compárela con el perímetro de la órbita. Discuta el resultado.

[1] Una discusión detallada del sistema internacional de unidades y sus derivados puede verse en Cruz *et al.* (1986).

[2] El inciso c) obviamente no es realista, al implicar partículas de 10 g con radios inferiores a 10^{-8} cm; sin embargo, es útil para ilustrar el orden de magnitud de la longitud de onda involucrada.

En el problema I.12, ecuaciones (I.80) y siguiente, encontramos las expresiones para los radios y las velocidades orbitales según el modelo de Bohr para las órbitas circulares del electrón de un átomo hidrogenoide. Para el átomo de hidrógeno el estado de mínima energía corresponde a una órbita circular con $Z = 1$ y $n = 1$, lo que da

$$r_1 = 4\pi\varepsilon_0 \frac{\hbar^2}{me^2}, \tag{II.4}$$

$$v_1 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{\hbar}. \tag{II.5}$$

La longitud de onda de de Broglie asociada a electrones que se mueven con esta velocidad es

$$\lambda = \frac{h}{mv_1} = \frac{2\varepsilon_0 h^2}{me^2} \tag{II.6}$$

y coincide con el perímetro de la órbita de Bohr, dado por

$$2\pi r_1 = \frac{2\varepsilon_0 h^2}{me^2}. \tag{II.7}$$

Esta coincidencia significa que la órbita del electrón atómico en el estado base corresponde a una onda completa de de Broglie, cerrada sobre sí misma. El resultado recuerda las vibraciones estacionarias de un anillo elástico, cuyas longitudes de onda corresponden a la circunferencia del anillo dividida por un entero, de tal forma que cada onda empalma exactamente con la siguiente. Sólo estos modos de vibración conducen a una situación estacionaria (son permitidos, en el presente lenguaje), pues los que corresponden a un número no entero de longitudes de onda dan lugar a interferencia destructiva, de tal forma que las vibraciones desaparecen rápidamente.

Tomando como buena la analogía para el comportamiento ondulatorio del átomo de hidrógeno, se puede decir que el electrón sólo puede girar indefinidamente (es decir, sin radiar), si su órbita contiene un número entero de longitudes de onda de de Broglie. En efecto, de los resultados del problema I.12 sigue que para cualquier órbita circular se tiene

$$v_n = \frac{n\hbar}{mr_n}, \tag{II.8}$$

por lo que la longitud de onda de de Broglie asociada al electrón en dicha órbita es

$$\lambda = \frac{2\pi r_n}{n}, \tag{II.9}$$

o bien,

$$n\lambda = 2\pi r_n = \text{perímetro de la órbita}, \quad n = 1, 2, 3, ..., \tag{II.10}$$

lo que verifica la aserción (véase el problema II.10). Sin embargo, debe apreciarse claramente que mientras no se asigne a la longitud de onda de de Broglie un sentido físico equivalente a una vibración, la descripción anterior posee meramente el carácter de analogía.[3]

[3] Algunos físicos, entre quienes cabe mencionar de manera especial a Louis de Broglie y David Bohm, han considerado a la función de onda como descripción de un campo físico, tan real como, por ejemplo, el electromagnético. Sin embargo, debe quedar claro que este campo tendría (¿o tiene?) propiedades muy diferentes a las de cualquier otro campo físico conocido, como, por ejemplo, la de que sus efectos cuánticos son independientes de su intensidad, pues, como se verá más adelante, ellos son independientes de la normalización de la función de onda.

II.4 Compare las dimensiones de un sistema atómico (representadas por el radio de la primera órbita de Bohr) con la longitud de onda de la luz en el rojo y en el azul.

Calcule la energía adquirida por un electrón acelerado por un potencial de 1 volt y determine la longitud de onda de un fotón con esta energía. ¿En qué región del espectro está situada?

Las longitudes de onda correspondientes al rojo y al azul se pueden tomar como $\lambda_r = 6500$ Å y $\lambda_a = 4300$ Å, respectivamente.[4] El radio de la primera órbita de Bohr tiene magnitud $a = 5.3 \times 10^{-11}$ m $= 0.53$ Å. Por lo tanto

$$\frac{\lambda_r}{a} = 1.23 \times 10^4, \quad \frac{\lambda_a}{a} = 8.11 \times 10^3. \tag{II.11}$$

Estos resultados muestran que la longitud de onda de la luz visible es mucho mayor que las dimensiones atómicas, por un factor del orden de 10^4.

La energía adquirida por un electrón acelerado por un potencial de 1 volt es 1 eV$= 1.6 \times 10^{-19}$ J (esta es la definición del electrón-volt). Un fotón con esta energía satisface la condición

$$h\nu = hc/\lambda = 1.6 \times 10^{-19}\text{J}$$

y su longitud de onda es, por tanto,

$$\lambda_{\text{fotón}} = 1.242 \times 10^{-6} \text{ m} = 12420 \text{ Å}.$$

Esta longitud de onda se encuentra en la zona infrarroja lejana del espectro. En cambio, la longitud de onda de de Broglie del electrón con esta misma energía es mucho más pequeña. Para determinarla usamos

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2me_0V}} \tag{II.12}$$

o sea (con V en volts),

$$\lambda_{\text{electrón}} = \frac{6.6 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times 0.9 \times 10^{-30} \times 1.6 \times 10^{-19}V}} \text{ m} \approx \frac{12.3}{\sqrt{V}} \text{ Å}.$$

Para $V = 1$ volt se obtiene un valor mil veces menor que el del fotón, y próximo a las dimensiones atómicas.

II.5 Considere dos amplitudes ψ_1 y ψ_2 que corresponden cada una a una distribución gaussiana de partículas, centradas en $x = a_1$ y $x = a_2$ $(a_2 > a_1)$, respectivamente, y de anchura σ:

$$\psi_1 = A_1 e^{-(x-a_1)^2/4\sigma^2}, \quad \psi_2 = A_2 e^{-(x-a_2)^2/4\sigma^2}. \tag{II.13}$$

Determine los coeficientes de normalización A_1 y A_2

A partir de las amplitudes anteriores se construyen dos nuevas amplitudes ψ_+ y ψ_-, definidas como

$$\psi_\pm = a_\pm \left(\psi_1 \pm \psi_2\right).$$

Determine las constantes de normalización a_+ y a_-. Construya y grafique las densidades de partículas $\rho_\pm = |\psi_\pm|^2$. Estudie los casos límite $\sigma \to \infty$, $\sigma \to 0$.

[4] Estos valores son cercanos a las líneas H_α y H_γ de la serie de Balmer del hidrógeno, respectivamente.

La condición de normalización para la amplitud de probabilidad es

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (x)\, \psi (x)\, dx. \tag{II.14}$$

Aplicando esta condición a ψ_1 y haciendo el cambio de variable $y = x - a_1$ se obtiene

$$1 = |A_1|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-a_1)^2/2\sigma^2} dx = |A_1|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2\sigma^2} dy. \tag{II.15}$$

La integral requerida se encuentra tabulada en cualquier tabla de integrales; sin embargo, con fines de referencia damos a continuación una fórmula más general. Utilizando la definición de la función gamma (véanse los apéndices informativos), un simple cambio de variable muestra que

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha y^2} y^n dy = \tfrac{1}{2}\alpha^{-(n+1)/2}\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right), \quad n \geq -1. \tag{II.16}$$

Los casos particulares de esta expresión $n = 0, 1, 2$ son especialmente importantes y debe conocérseles con familiaridad. Algunas propiedades de la función gamma de interés para nuestros propósitos, son las siguientes:

$$\Gamma (n+1) = n!, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{II.17}$$

$$\Gamma (n+1) = n\Gamma (n), \quad \Gamma(0) = 1, \tag{II.18}$$

$$\Gamma \left(\tfrac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}. \tag{II.19}$$

En el presente caso, $n = 0$, $\alpha = 1/2\sigma^2$ y se obtiene

$$1 = |A_1|^2 \sqrt{2\pi}\sigma,$$

por lo que, tomando A_1 como real y positiva,

$$A_1 = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}}. \tag{II.20}$$

Como el resultado es independiente del desplazamiento a_1, se obtiene el mismo valor para $A_2 : A_2 = A_1 \equiv A$. De las expresiones anteriores sigue para la densidad de partículas en el estado ψ_1

$$\rho_1(x) = \psi_1^* \psi_1 = A_1^2 e^{-(x-a_1)^2/2\sigma^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(x-a_1)^2/2\sigma^2}. \tag{II.21}$$

Es oportuno hacer la siguiente observación incidental. Con ayuda de la fórmula (II.16) es relativamente inmediato comprobar que el valor medio de x obtenido promediando sobre la distribución anterior es

$$\bar{x} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x\rho_1(x)dx = a_1, \tag{II.22}$$

por lo que $\rho_1(x)$ se puede escribir en la forma alternativa

$$\rho_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(x-\bar{x})^2/2\sigma^2}. \tag{II.23}$$

La ecuación (II.23) es la forma general de una *distribución normal* (o *gaussiana*) unidimensional (o univariada); nótese que esta distribución está caracterizada por dos parámetros, que representan el valor medio $\bar{x}$ y la anchura (o dispersión) σ (estas propiedades de la distribución normal se discuten con mayor detalle en el siguiente problema).

Construimos ahora las amplitudes

$$\psi_\pm = a_\pm \left(\psi_1 \pm \psi_2\right) = a_\pm A \left[e^{-(x-a_1)^2/4\sigma^2} \pm e^{-(x-a_2)^2/4\sigma^2}\right]. \tag{II.24}$$

La condición de normalización es en este caso

$$1 = |a_\pm|^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{-(x-a_1)^2/4\sigma^2} \pm e^{-(x-a_2)^2/4\sigma^2}\right]^2 dx. \tag{II.25}$$

El desarrollo del integrando conduce a dos integrales ya realizadas en este mismo ejercicio; escribiendo explícitamente la tercera se obtiene

$$1 = |a_\pm|^2 A^2 \left[2\sigma\sqrt{2\pi} \pm 2e^{-\left(a_1^2+a_2^2\right)/4\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left[x^2-(a_1+a_2)x\right]/2\sigma^2} dx\right]. \tag{II.26}$$

Esta integral se evalúa con facilidad al completar el cuadrado perfecto y escribir

$$x^2 - (a_1+a_2)\,x = \left(x - \frac{a_1+a_2}{2}\right)^2 - \tfrac{1}{4}\left(a_1+a_2\right)^2 = y^2 - \tfrac{1}{4}\left(a_1+a_2\right)^2, \tag{II.27}$$

lo que conduce, con ayuda de (II.16) y (II.20), a

$$\begin{aligned} 1 &= |a_\pm|^2 A^2 \left[2\sigma\sqrt{2\pi} \pm 2e^{-\left(a_1^2+a_2^2\right)/4\sigma^2} e^{(a_1+a_2)^2/8\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2\sigma^2} dy\right] \\ &= 2\,|a_\pm|^2 \left[1 \pm e^{-(a_1-a_2)^2/8\sigma^2}\right]. \end{aligned} \tag{II.28}$$

Por lo tanto se puede tomar

$$a_\pm = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left[1 \pm e^{-(a_1-a_2)^2/8\sigma^2}\right]^{-1/2}, \tag{II.29}$$

con lo que queda

$$\rho_\pm = \frac{1}{\sqrt{8\pi}\sigma} \left[1 \pm e^{-(a_1-a_2)^2/8\sigma^2}\right]^{-1} \left[e^{-(x-a_1)^2/4\sigma^2} \pm e^{-(x-a_2)^2/4\sigma^2}\right]^2. \tag{II.30}$$

Los dos casos límite, $\sigma \to 0$ y $\sigma \to \infty$, merecen consideración especial. Para analizarlos estudiaremos algunas propiedades de la distribución gaussiana o normal que corresponde a cada una de las funciones de onda ψ_1, ψ_2 anteriores, y descrita por cualquiera de las ecuaciones (II.21) o (II.23). Por ser irrelevante, en lo que sigue omitiremos el índice 1 o 2 con que fueron distinguidas esas distribuciones.

a) Caso $\sigma \to 0$. De (II.21) es claro que para $x \neq a$ el exponencial se anula en este límite, por lo que resulta

$$\rho(x) = 0, \quad x \neq a.$$

Sin embargo, en el punto $x = a$ el exponente se anula, la exponencial es igual a la unidad y resulta

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \lim_{\sigma\to 0} \infty, \quad x = a.$$

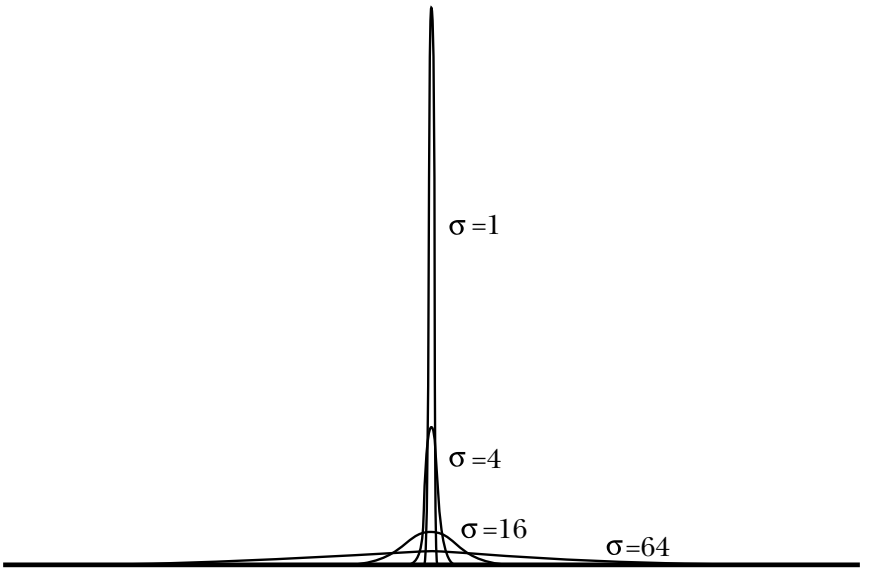


FIGURA II.1 *Comparación entre varias distribuciones normales para diferentes valores de la variancia.*

Estos dos resultados se pueden combinar en uno solo, con ayuda de la distribución δ de Dirac:

$$\lim_{\sigma\to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(x-a)^2/2\sigma^2} = \delta(x-a). \tag{II.31}$$

Es posible verificar que las propiedades integrales de ambos miembros son equivalentes. Este resultado dice que la función δ puede verse como el caso límite de una distribución gaussiana cuya anchura se hace cada vez más pequeña; la normalización hace que al mismo tiempo la altura aumente, hasta hacerse finalmente infinita en un punto único y nula en el resto del espacio. En la figura II.1 puede verse claramente este comportamiento.

b) Caso $\sigma \to \infty$. En este límite el exponente se anula para toda x, por lo que la distribución se reduce a

$$\rho(x) = \lim_{\sigma\to\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} = \text{const.} \tag{II.32}$$

Se trata por lo tanto de una distribución uniforme. Como esta distribución se extiende sobre toda la recta real, la constante de normalización resulta nula; pero basta que se considere la distribución como uniforme dentro del tramo finito $(-L, L)$ y nula fuera de él, para que la constante de normalización se torne finita (e igual a $1/2L$). Al final puede pasarse al límite $L \to \infty$. Vemos que una distribución uniforme puede considerarse como el límite de una distribución normal cuya anchura crece indefinidamente. En la figura II.1 se ilustran estas propiedades.

El comportamiento límite de las densidades $\rho_\pm$ se determina simplemente de los resultados anteriores, por lo que no requiere discusión especial.

II.6 Si $\rho(x)$ es la densidad de partículas, el valor medio de la variable $A(x)$ es, por definición, $\bar{A} = \int_{-\infty}^{\infty} A(x)\,\rho(x)\,dx$. Encuentre $\bar{x}$ y $\overline{x^2}$ cuando la densidad de partículas es $\rho_1 = |\psi_1|^2$ y cuando es $\rho_+ = |\psi_+|^2$, en donde ψ_1 y ψ_+ son las amplitudes

del problema anterior. ¿Cuál es el sentido de los parámetros a y σ que aparecen en la distribución normal?

a) Para $\rho_1 = |\psi_1(x)|^2$ tenemos, utilizando la ecuación (II.23),

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}(y+a_1)e^{-y^2/2\sigma^2}dy = \frac{a_1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2/2\sigma^2}dy, \tag{II.33}$$

donde se puso $y = x - a_1$ y se tomó en cuenta que la primera integral se anula, por ser impar su integrando). Con ayuda de la fórmula (II.16), con $n = 0$ se obtiene

$$\overline{x} = \frac{a_1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\cdot\sigma\sqrt{2\pi} = a_1. \tag{II.34}$$

Este resultado muestra que el parámetro a_1 (ó a_2, ó a) que aparece en las amplitudes y en las distribuciones gaussianas del problema II.5, como la (II.21), representa el correspondiente valor medio de la variable x.

De manera análoga se obtiene

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} x^2\rho(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}(y+a_1)^2e^{-y^2/2\sigma^2}dx = \sigma^2 + a_1^2. \tag{II.35}$$

Como $a_1 = \overline{x}$, este resultado se puede reescribir en la forma

$$\overline{x^2} - \overline{x}^2 = \sigma^2, \tag{II.36}$$

o bien,

$$\overline{(x-\overline{x})^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2 = \sigma^2, \tag{II.37}$$

lo cual permite identificar a σ con la *variancia* o *dispersión* de la variable x. Con esto queda identificado el significado de los dos parámetros que caracterizan una distribución normal, como la dada en la ecuación (II.23). Las diversas distribuciones gaussianas mostradas en la figura II.1 están todas centradas en el mismo valor medio, y difieren sólo por el valor de su variancia, que va de 1 a 64.

b) Para $\rho_+ = |\psi_+(x)|^2$ se tiene

$$\begin{aligned}
\overline{x} &= |a_+|^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x\left[e^{-(x-a_1)^2/4\sigma^2} + e^{-(x-a_2)^2/4\sigma^2}\right]^2 dx \\
&= |a_+|^2 A^2 \left\{\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-(x-a_1)^2/2\sigma^2}dx + \int_{-\infty}^{\infty} xe^{-(x-a_2)^2/2\sigma^2}dx \right. \\
&\quad \left. +2e^{-(a_1-a_2)^2/8\sigma^2}\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-[x-(a_1+a_2)/2]^2/2\sigma^2}dx\right\}.
\end{aligned} \tag{II.38}$$

Realizando cambios de variable como el que se usó en conexión con la ecuación (II.15) y cancelando las integrales con integrando impar que se anulan, queda

$$\begin{aligned}
\overline{x} &= |a_+|^2 A^2 \left[a_1\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2\sigma^2}dy + a_2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2\sigma^2}dy \right. \\
&\quad \left. +2\frac{a_1+a_2}{2}e^{-(a_1-a_2)^2/8\sigma^2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2\sigma^2}dy\right].
\end{aligned} \tag{II.39}$$

Con ayuda de las ecuaciones (II.20) y (II.28) se obtiene directamente

$$\overline{x} = \tfrac{1}{2}(a_1 + a_2), \tag{II.40}$$

resultado que muestra que la distribución ρ_+ está centrada en la posición media de los dos centros a_1 y a_2.

De manera análoga se tiene

$$\begin{aligned}\overline{x^2} &= |a_+|^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \left[e^{-(x-a_1)^2/4\sigma^2} + e^{-(x-a_2)^2/4\sigma^2}\right]^2 dx \\ &= |a_+|^2 A^2 \left\{2\int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2/2\sigma^2} dy + \left(a_1^2 + a_2^2\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2\sigma^2} dy \right. \\ &\quad + e^{-(a_1-a_2)^2/8\sigma^2} \left[2\int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2/2\sigma^2} dy \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(a_1+a_2)^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2\sigma^2} dy\right]\right\}, \end{aligned} \tag{II.41}$$

lo que conduce a

$$\begin{aligned}\overline{x^2} &= \sigma^2 + \tfrac{1}{2} \frac{a_1^2 + a_2^2 + \frac{1}{2}(a_1+a_2)^2 e^{-(a_1-a_2)^2/8\sigma^2}}{1 + e^{-(a_1-a_2)^2/8\sigma^2}} \\ &= \sigma^2 + \bar{x}^2 + \tfrac{1}{4} \frac{(a_1-a_2)^2}{1 + e^{-(a_1-a_2)^2/8\sigma^2}}. \end{aligned} \tag{II.42}$$

Este resultado muestra que la distribución compuesta ρ_+ es en general más dispersiva que sus partes ρ_1 o ρ_2, porque

$$\sigma_+^2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \geq \sigma^2. \tag{II.43}$$

Sólo para el caso particular en que ambas amplitudes de igual dispersión están centradas en el mismo valor ($a_1 = a_2$) se obtiene $\sigma_+^2 = \sigma^2$.

II.2. Problemas adicionales

II.7 Determine la longitud de onda de de Broglie de un haz de electrones producido por un acelerador de 1 GeV ($= 10^9$ eV).

La energía impartida a los electrones (10^3 MeV) es considerablemente mayor que la masa en reposo de un electrón (0.5 MeV); esto significa que los electrones alcanzan velocidades muy cercanas a la de la luz, por lo que deben emplearse las expresiones relativistas para determinar la longitud de onda de de Broglie. Como en la fórmula para la energía

$$E = \sqrt{m_e^2 c^4 + p^2 c^2} \tag{II.44}$$

el primer término del subradical resulta despreciable respecto del segundo, se puede aproximar

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{E}. \tag{II.45}$$

El cálculo numérico da

$$\lambda = \frac{6.6 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{10^9 \times 1.6 \times 10^{-19}} \text{ m} = 1.2 \times 10^{-15} \text{ m} = 1.2 \text{ fm}.$$

El resultado, que es del orden de las dimensiones de los núcleos atómicos, muestra que con tales electrones puede explorarse el interior de los núcleos. Por esta razón, se les ha usado también para estudiar las estructuras eléctrica y magnética de los nucleones (es decir, del protón y del neutrón), cuyas dimensiones son similares.

II.8 Este problema consta de dos partes:

a) Calcule la masa relativista de un electrón cuya longitud de onda de de Broglie es $\lambda = 0.042$ Å.

b) Defina una masa efectiva m^* del fotón mediante la expresión $E = hc/\lambda = m^*c^2$. ¿Cuánto vale esta masa efectiva para fotones con longitud de onda $\lambda = 0.042$ Å?

a) De la expresión relativista

$$E = mc^2 = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} \tag{II.46}$$

sigue que

$$m = \sqrt{m_0^2 + \frac{p^2}{c^2}} = \sqrt{m_0^2 + \frac{h^2}{c^2\lambda^2}} = m_0\sqrt{1 + \left(\frac{\lambda_C}{\lambda}\right)^2}, \tag{II.47}$$

en donde $\lambda_C = h/m_0c$ es la longitud de onda de Compton del electrón. Nótese que de aquí sigue que la longitud de onda de de Broglie se puede expresar en la forma

$$\lambda = \frac{h}{c\sqrt{m^2 - m_0^2}}. \tag{II.48}$$

Sustituyendo en (II.47) $\lambda = 0.0420$ Å, se obtiene

$$m = m_0\sqrt{1 + \left(\frac{2\pi \times 3.8615}{42}\right)^2} = 1.155m_0 = 1.052 \times 10^{-30} \text{ kg}. \tag{II.49}$$

b) De la definición propuesta para la masa efectiva del fotón podemos escribir

$$m^* = \frac{h}{\lambda c} = \frac{\lambda_C}{\lambda}m_0, \tag{II.50}$$

en donde m_0 es cualquier masa apropiada de referencia, con $\lambda_C = h/m_0c$ la correspondiente longitud de onda de Compton; por conveniencia, aquí hemos tomado los parámetros que se refieren al electrón. La comparación de (II.47) y (II.50) muestra que m y m^* difieren sólo por la presencia o no de la masa en reposo. Para $\lambda = 0.0420$ Å se obtiene

$$m^* = 0.577m_0 = 5.262 \times 10^{-31} \text{ kg}. \tag{II.51}$$

II.9 Escriba la longitud de onda de de Broglie para partículas de energía arbitraria, en términos de la energía cinética.

Por tratarse de energía arbitraria es necesario utilizar las fórmulas relativistas. La energía cinética relativista T es

$$T = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} - mc^2. \tag{II.52}$$

Despejando el cuadrado del momento se obtiene

$$p^2 = \frac{1}{c^2}\left(T^2 + 2mc^2T\right) = m^2c^2\left(K^2 + 2K\right), \tag{II.53}$$

en donde se ha introducido la variable adimensional

$$K = \frac{T}{mc^2} \tag{II.54}$$

que expresa la energía cinética en unidades de mc^2. Por lo tanto,

$$p = |\mathbf{p}| = mc\sqrt{K(K+2)}. \tag{II.55}$$

La longitud de onda de de Broglie resulta entonces dada por

$$\lambda = \frac{\lambda_C}{\sqrt{K(K+2)}}, \tag{II.56}$$

donde $\lambda_C = h/mc$ es la longitud de onda de Compton para la partícula. En el límite clásico $K \ll 1$ y se obtiene $\lambda = \lambda_C/\sqrt{2K}$; con K dada por (II.54) se recupera la conocida fórmula no relativista $\lambda = h/mv$. En el extremo opuesto (ultrarrelativista) se tiene $K \gg 1$, lo que da $\lambda = \lambda_C/K = hc/E$, en coincidencia con la ecuación (II.45). Nótese que en este límite la longitud de onda de de Broglie varía inversamente con la energía, al igual que la longitud de onda del fotón.

II.10 En el problema ilustrativo 1.1 del texto se consideran partículas en un estado estacionario dentro de una caja unidimensional de lado a; los choques contra las paredes se consideran elásticos. Estudie este problema a partir de la relación de de Broglie.

Debido a la condición de estacionaridad es de esperarse que exista una relación como la dada por la ecuación (II.10). Sin embargo, hay una diferencia importante que debe tomarse en cuenta: como en el presente caso los extremos de la caja son diferentes (es decir, no coinciden en un punto, como sucede con las órbitas atómicas cerradas), la condición puede relajarse para demandar que dentro del perímetro a quepa un número entero de *medias* longitudes de onda (y dentro del perímetro cerrado $2a$, un número entero de longitudes de onda). Escribimos entonces

$$a = \tfrac{1}{2}\lambda n, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{II.57}$$

Combinando con la relación de de Broglie se obtiene

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2a}{n}, \tag{II.58}$$

de donde sigue que el momento lineal y la energía pueden tomar los valores

$$p_n = \frac{\pi\hbar}{a}n, \quad E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \tag{II.59}$$

resultados que coinciden con los previamente hallados.

II.11 Electrones con energía cinética de 6 eV inciden en un ángulo θ respecto a la normal sobre una red cristalina cuyos planos están espaciados una distancia de 5 Å; en estas condiciones se observa difracción de Bragg de primer orden. Determine el valor del ángulo θ.

De la ley de Bragg

$$2d \operatorname{sen}\theta = n\lambda, \quad n = 0, 1, \ldots, \tag{II.60}$$

sigue que para difracción de primer orden ($n = 1$) se cumple que

$$\operatorname{sen}\theta = \frac{\lambda}{2d}. \tag{II.61}$$

Combinando con el postulado de de Broglie en su versión no relativista

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_0 T}}, \tag{II.62}$$

donde T es la energía cinética de los electrones, sigue que

$$\operatorname{sen}\theta = \frac{h}{2d\sqrt{2m_0 T}} = \frac{\pi\hbar c}{d\sqrt{2m_0 c^2 T}}. \tag{II.63}$$

Sustituyendo $d = 5 \times 10^{-8}$ cm, $\hbar c = 1.973 \times 10^{-5}$ eV$\cdot$ cm, $m_0 c^2 = 5.11 \times 10^5$ eV y $T = 6$ eV, se obtiene

$$\operatorname{sen}\theta = 0.5, \quad \Rightarrow \quad \theta = 30^0.$$

II.12 Determine la presión que la radiación electromagnética absorbida por un cuerpo ejerce sobre éste, como función de la intensidad luminosa.

Consideremos un cuerpo sobre cuya superficie incide normalmente un haz monocromático de N fotones por unidad de área y de tiempo. Suponiendo que el cuerpo absorbe todo el flujo incidente y que cada fotón le suministra un momento $p = h/\lambda$, la presión ejercida por el haz resulta

$$P = Np = Nh/\lambda = N\hbar\omega/c. \tag{II.64}$$

Como $N\hbar\omega$ es la energía luminosa incidente por unidad de área y unidad de tiempo, o sea la intensidad luminosa incidente I, tendremos finalmente

$$P = \frac{I}{c}. \tag{II.65}$$

Nótese que si en vez de absorber la radiación, la superficie la refleja totalmente, el cambio de momento en cada evento es $2p$, por lo que la presión de radiación resulta $2I/c$ en este caso.

II.3. Ejercicios

II.13 Calcule la longitud de onda de de Broglie de un neutrón que se mueve con velocidad del orden de la velocidad de agitación térmica a temperatura ambiente. ¿Qué le sucede a un haz de neutrones térmicos al incidir sobre un cristal?

II.14 Calcule la longitud de onda de de Broglie para un electrón en la segunda órbita de Bohr del hidrógeno.

II.15 Se desea diseñar un experimento para corroborar que los electrones pueden difractarse. Se pretende emplear como rejilla de difracción un cristal de cloruro de cesio, cuya distancia entre iones es de 3.5 Å. ¿Con qué velocidad deben incidir los electrones para que su longitud de onda coincida con el parámetro de la malla cristalina?

II.16 Los electrones de conducción en el cobre tienen energía cinética de 7 eV, aproximadamente. Calcule la longitud de onda de estos electrones y compárela con la distancia interatómica. El número de masa y la densidad del cobre son $A = 60$ y $\rho = 8.9 \times 10^3$ kg$\cdot$ m^{-3}, respectivamente.

II.17 Determine la longitud de onda de un haz de neutrones que exhibe difracción de primer orden por un cristal. El haz incide a un ángulo de 40^0 respecto al conjunto de planos de la red cristalina, cuyo espaciamiento es de 2.85 Å. ¿Cuál es la energía cinética de los neutrones incidentes?

II.18 En la óptica tradicional un instrumento óptico no alcanza a resolver detalles de un objeto menores que la longitud de onda usada para la observación. Por ejemplo, un virus de 200 Å de diámetro no puede ser estudiado con un instrumento que usa luz visible en la región de los miles de Angstroms. Sin embargo, un microscopio electrónico lo hace posible. Determine qué potencial de aceleración se requiere para obtener electrones con longitud de onda de de Broglie $10^2 - 10^3$ veces menores que las dimensiones del virus.

II.19 Un haz colimado de neutrones monoenergéticos que viajan con velocidad v incide sobre la superficie de un cristal formando un ángulo φ_0 con el plano del cristal (φ_0 es el complemento del ángulo de incidencia). El haz sufre difracción de Bragg de orden m. Se pone en movimiento la fuente de neutrones, alejándola del cristal con velocidad u normal al plano, con $u \ll v$. ¿A qué ángulo φ debe dirigirse el haz de neutrones para que se produzca la difracción de orden m?

II.20 Una técnica para monocromatizar[5] un haz de neutrones lentos consiste en enviar todo el haz hacia un cristal de estructura conocida, y poner el colector en la posición justa para recibir el haz monocromático de neutrones difractados. Supóngase que se emplea un cristal cuya distancia entre capas sucesivas es de 1.2 Å. Considerando sólo difracción de Bragg de orden 1, ¿a qué ángulo respecto de la dirección inicial del haz debe orientarse el colector para seleccionar los neutrones con $\lambda = 0.8$ Å?

II.21 Con referencia al problema II.10, considere un pozo infinito unidimensional de anchura a, con N electrones independientes que ocupan por parejas los primeros $N/2$ niveles de energía. Determine el valor de la energía total y la fuerza total que ejercen los electrones sobre las paredes del pozo, como función de N y a.

II.22 Considere un problema con simetría esférica, descrito por la amplitud de probabilidad $\psi(r) = N \exp(-r/a)$, donde r es la coordenada radial, con $r = [0, \infty)$. Determine el valor del factor N para que ψ esté normalizada a la unidad y el valor medio de r para esta distribución.

[5]Por analogía con la óptica, se emplea el término *monocromático* para referirse a un haz cuyas partículas tienen todas la misma longitud de onda de de Broglie (si todas las partículas tienen la misma masa, el haz es a la vez monoenergético).

II.23 Un espejo refleja totalmente un haz que transporta energía de 3.8×10^4 J y que incide perpendicularmente sobre su superficie. Detemine el momento total transferido al espejo, cuando la energía reflejada es transportada por un haz monocromático de

a) fotones con longitud de onda de 6000 Å;

b) electrones que viajan con velocidad de $0.1c$;

c) neutrones con energía cinética de 1 eV.

¿Cuál es la longitud de onda asociada a los electrones del inciso b) y a los neutrones del inciso c)? ¿Depende el resultado del inciso a) de la longitud de onda de los fotones reflejados?

II.24 Repita el problema anterior para el caso en que la radiación incide a 45^0 sobre la superficie.

III. Ecuación estacionaria de Schrödinger

III.1. Problemas del texto

III.1 Una función dada $\psi(x)$, arbitraria pero periódica, está definida en el intervalo $(-\pi, \pi)$ en forma de serie de Fourier

$$\psi\left(x\right) = \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{A_n}{\sqrt{\pi}}\cos nx + \frac{B_n}{\sqrt{\pi}}\,\mathrm{sen}\, nx\right). \tag{III.1}$$

Partiendo de las expresiones generales del texto y recurriendo a las propiedades de ortogonalidad de las funciones seno y coseno, obtenga los coeficientes A_0, A_n y B_n para esta $\psi\left(x\right)$.

Supondremos que la serie definida en (III.1) converge uniformemente en el intervalo $-\pi \leq x \leq \pi$; si esto ocurre, la serie converge uniformemente para toda x. Multiplicamos (III.1) por $\cos mx$, con m un número entero positivo, para obtener

$$\psi\left(x\right)\cos mx = \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}}\cos mx + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{A_n}{\sqrt{\pi}}\cos nx\cos mx + \frac{B_n}{\sqrt{\pi}}\,\mathrm{sen}\, nx\cos mx\right).$$

Esta serie aún es convergente y puede integrarse término a término, lo que da

$$\begin{aligned}\int_{-\pi}^{\pi}\psi(x)\cos mx\,dx &= \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\pi}^{\pi}\cos mx\,dx + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{A_n}{\sqrt{\pi}}\int_{-\pi}^{\pi}\cos nx\cos mx\,dx \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{B_n}{\sqrt{\pi}}\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{sen}\, nx\cos mx\,dx.\end{aligned}$$

Recurriendo a las propiedades de ortogonalidad de las funciones seno y coseno,

$$\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{sen}\, nx\cos mx\,dx = 0, \quad \forall\ n, m > 0 \tag{III.2}$$

$$\int_{-\pi}^{\pi}\cos nx\cos mx\,dx = \int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{sen}\, nx\ \mathrm{sen}\, mx\,dx = \pi\delta_{nm}, \tag{III.3}$$

se obtiene

$$\int_{-\pi}^{\pi}\psi\left(x\right)\cos mx\,dx = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{A_n}{\sqrt{\pi}}\pi\delta_{nm} = A_m\sqrt{\pi},$$

lo que conduce a la bien conocida expresión para los coeficientes de Fourier del coseno:

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \psi\,(x) \cos nx\, dx. \tag{III.4}$$

La expresión para los coeficientes B_n se obtiene de manera análoga, pero multiplicando la serie (III.1) por $\operatorname{sen} mx$, para luego integrar:

$$\begin{aligned}\int_{-\pi}^{\pi} \psi(x) \operatorname{sen} mx\, dx &= \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sen} mx\, dx + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{A_n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx\, \operatorname{sen} mx\, dx \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sen} nx\, \operatorname{sen} mx\, dx.\end{aligned}$$

Utilizando las propiedades de ortogonalidad esta expresión se reduce a

$$\int_{-\pi}^{\pi} \psi\,(x) \operatorname{sen} mx\, dx = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_n}{\sqrt{\pi}} \pi \delta_{nm} = B_m \sqrt{\pi},$$

o bien

$$B_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \psi\,(x) \operatorname{sen} nx\, dx. \tag{III.5}$$

Finalmente, el coeficiente A_o se determina integrando directamente la serie (III.1):

$$\int_{-\pi}^{\pi} \psi\,(x)\, dx = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}}\, dx + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{A_n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx\, dx + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sen} nx\, dx,$$

pues de aquí sigue que

$$A_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \psi\,(x)\; dx. \tag{III.6}$$

Este resultado muestra que el coeficiente A_0 es proporcional al valor medio de $\psi\,(x)$ en el intervalo $(-\pi, \pi)$. Cuando $\psi\,(x)$ es una función par en $(-\pi, \pi)$, los coeficientes B_n se anulan y se obtiene una serie de cosenos, mientras que para funciones impares son los coeficientes A_n los que se anulan y la serie es de senos.

III.2 Obtenga la transformada integral de Fourier de las siguientes funciones:

a) La función cuadrada $F\,(x) = \begin{cases} a, & |x| \leq d/2, \\ 0, & \text{en caso contrario.} \end{cases}$

b) El paquete de ondas $F\,(x) = \begin{cases} ae^{-iqx}, & |x| \leq d/2, \\ 0, & \text{en caso contrario.} \end{cases}$

c) La distribución lorentziana $F\,(x) = \dfrac{\delta}{\pi\,(\delta^2 + x^2)}$.

d) La distribución gaussiana $F\,(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} e^{-x^2/2\Delta^2}$.

La transformada de Fourier $\widetilde{F}(k)$ de una función $F(x)$ la definimos en la siguiente forma usual[1]

$$\widetilde{F}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} F(x)\, dx. \tag{III.7}$$

Aplicamos esta definición a los casos anteriores, como sigue:

a) $\widetilde{F}(k) = \dfrac{a}{\sqrt{2\pi}} \displaystyle\int_{-d/2}^{d/2} e^{ikx}\, dx = \frac{a}{i\sqrt{2\pi}k} \left(e^{ikd/2} - e^{-ikd/2}\right)$, que se reduce a

$$\widetilde{F}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{a}{k} \operatorname{sen} \tfrac{1}{2} kd. \tag{III.8}$$

b) $\widetilde{F}(k) = \dfrac{a}{\sqrt{2\pi}} \displaystyle\int_{-d/2}^{d/2} e^{i(k-q)x}\, dx = \frac{a}{i\sqrt{2\pi}(k-q)} \left[e^{i(k-q)d/2} - e^{-i(k-q)d/2}\right]$, o sea

$$\widetilde{F}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{a}{k-q} \operatorname{sen} \tfrac{1}{2}(k-q)d. \tag{III.9}$$

c) $\widetilde{F}(k) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \dfrac{\delta}{\pi} \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{\delta^2 + x^2} dx$. Separando parte par e impar del integrando queda

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{\delta^2 + x^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos kx}{\delta^2 + x^2} dx + i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sen} kx}{\delta^2 + x^2} dx = 2 \int_{0}^{\infty} \frac{\cos kx}{\delta^2 + x^2} dx;$$

con ayuda de las tablas de integrales obtenemos

$$\widetilde{F}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\delta|k|}, \quad \operatorname{Re}\delta > 0. \tag{III.10}$$

Esta integral puede evaluarse de manera simple pasando al plano complejo de la variable x con la transformación $x \to z$ y cerrando el contorno de integración con un arco circular de radio infinito en el semiplano superior ($z > 0$) si $k > 0$, o en el inferior ($z < 0$) si $k < 0$. Para $k > 0$ el único polo encerrado por el contorno de integración C se encuentra en $z = i\delta$, con residuo

$$\left. \frac{e^{ikz}}{(z + i\delta)(z - i\delta)} (z - i\delta) \right|_{z = i\delta} = \frac{e^{-k\delta}}{2i\delta},$$

por lo que se obtiene

$$\begin{aligned} \widetilde{F}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\delta}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{\delta^2 + x^2} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\delta}{\pi} \oint_{\mathrm{C}} \frac{e^{ikz}}{\delta^2 + z^2} dz \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\delta}{\pi} 2\pi i \frac{e^{-k\delta}}{2i\delta} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-k\delta}, \quad \operatorname{Re}\delta > 0. \end{aligned}$$

[1] Detalles de la definición de la transformada de Fourier pueden variar de autor en autor. Los cambios frecuentes ocurren en el signo del exponencial y en el factor numérico, que aquí se ha escogido (como es muy usual) como $(2\pi)^{-1/2}$, pero que puede tomar otros valores, como 1 o $(2\pi)^{-1}$. La transformada inversa lleva el coeficiente $(2\pi)^{-1/2}, (2\pi)^{-1}$ o 1, respectivamente.

En forma análoga se procede en el caso $k < 0$, con lo que se recupera el resultado (III.10).

d) $\widetilde{F}(k) = \dfrac{1}{2\pi\Delta}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}e^{-x^2/2\Delta^2}dx = \dfrac{1}{2\pi\Delta}e^{-\Delta^2k^2/2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(x-i\Delta^2k\right)^2/2\Delta^2}dx,$

de donde

$$\widetilde{F}\,(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-k^2\Delta^2/2}. \tag{III.11}$$

Nótese que la transformada de Fourier de una distribución gaussiana con anchura Δ (como la dada en el inciso (d)), es otra distribución gaussiana, con anchura Δ^{-1}, es decir, $\sigma_x^2\sigma_k^2 = 1$. Véase el ejercicio III.12.

III.3 Resolver una ecuación de eigenvalores $\hat{L}\psi = \lambda\psi$ significa determinar las eigenfunciones ψ que la satisfacen y que cumplen ciertos requisitos, así como los correspondientes eigenvalores λ. Resuelva los siguientes problemas de valores propios.

a) $\hat{L}_a = id/dx$, con la condición de que $\psi\,(x) = \psi\,(x+a)$, es decir, que ψ sea periódica con periodo a;

b) $\hat{L}_b = d/dx$, bajo la condición de que ψ sea finita. ¿Qué sucede si se demanda además que $\psi\,(x) = \psi\,(x+s)$?

c) $\hat{L}_c$ es tal que $\hat{L}_c\psi\,(x) = \psi\,(-x)$.

Examine la ortogonalidad de las eigenfunciones en los tres casos anteriores.

a) La solución general de la ecuación diferencial

$$\hat{L}_a\psi = \psi, \quad \text{ó} \quad i\frac{d\psi}{dx} = \lambda\psi \tag{III.12}$$

es

$$\psi\,(x) = Ae^{-i\lambda x}, \tag{III.13}$$

con A una constante arbitraria. Si nos restringimos a soluciones periódicas con período a, o sea que $\psi\,(x) = \psi\,(x+a)$, tendremos que

$$Ae^{-i\lambda x} = Ae^{-i\lambda(x+a)},$$

por lo que debe cumplirse que $e^{i\lambda a} = 1$. Esto nos conduce al siguiente conjunto de eigenvalores y eigenfunciones:

$$\lambda_n = \frac{2\pi n}{a}, \qquad \psi_n\,(x) = A_n e^{-i2\pi nx/a}, \quad n \in Z. \tag{III.14}$$

Estas funciones propias son ortogonales en el intervalo $[-a/2, a/2]$ para valores diferentes de n, como puede comprobarse a partir de las propiedades de ortogonalidad de las funciones seno y coseno. Explícitamente,

$$\int_{-a/2}^{a/2}\psi_{n'}^*\,(x)\,\psi_n\,(x)\,dx = A_{n'}^*A_n\int_{-a/2}^{a/2}e^{i\frac{2\pi x}{a}(n'-n)}dx = A_{n'}^*A_n a\delta_{n'n}. \tag{III.15}$$

Si además se toma

$$A_n = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{a}}, \quad \alpha \text{ real}, \tag{III.16}$$

el conjunto queda normalizado a la unidad en $x \in [-a/2, a/2]$.

b) La solución general de la ecuación diferencial

$$\hat{L}_b\psi = \psi, \quad \text{ó} \quad \frac{d}{dx}\psi(x) = \lambda\psi(x) \tag{III.17}$$

es

$$\psi(x) = Ae^{\lambda x}, \tag{III.18}$$

con A una constante arbitraria. Esta función no es acotada, pues $\psi(x) \to \infty$ cuando $|x| \to \infty$, por lo que para imponer la condición de que $\psi(x)$ sea finita, debe restringirse el dominio de la variable x, excluyendo aquellos valores para los cuales la función se hace infinita.

Si además se pide que las eigenfunciones sean periódicas con periodo s, debe tenerse que

$$Ae^{\lambda x} = Ae^{\lambda(x+s)},$$

es decir (para $A \neq 0$), $e^{\lambda s} = 1$. Para λ real, la única solución permitida es $\lambda = 0$ y sólo existe un eigenvalor, que corresponde a la eigenfunción $\psi(x) = A = \text{const}$. Si se permite que λ sea un número imaginario, el problema se reduce al del caso anterior, por lo que no es necesario analizarlo. Por no existir más de una eigenfunción para λ real, no hay propiedades de ortogonalidad que analizar en este caso.

c) Como $\hat{L}_c$ es un operador tal que

$$\hat{L}_c\psi(x) = \psi(-x), \tag{III.19}$$

la correspondiente ecuación de eigenvalores es

$$\hat{L}_c\psi(x) = \lambda\psi(x) = \psi(-x). \tag{III.20}$$

Aplicando nuevamente el operador $\hat{L}_c$ se obtiene

$$\lambda^2\psi(x) = \psi(x).$$

Esto significa que los eigenvalores de $\hat{L}_c$ pueden ser sólo $\lambda = \pm 1$ y las eigenfunciones correspondientes son tales que

$$\begin{aligned} &\psi_s(x) = \psi_s(-x) \qquad \text{para} \lambda = 1, \\ &\psi_a(x) = -\psi_a(-x) \qquad \text{para} \lambda = -1. \end{aligned}$$

En otras palabras, las eigenfunciones de $\hat{L}_c$ son el conjunto de las funciones pares para el eigenvalor $+1$, y el de las funciones impares para el eigenvalor -1.

Si ahora se introduce un nuevo par de funciones *sin* paridad definida mediante las combinaciones lineales

$$\psi_+ = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\psi_s + \psi_a), \quad \psi_- = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\psi_s - \psi_a), \tag{III.21}$$

se tiene que

$$\hat{L}_c\psi_+ = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\psi_s - \psi_a) = \psi_-, \tag{III.22}$$

$$\hat{L}_c\psi_- = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\psi_s + \psi_a) = \psi_+, \tag{III.23}$$

es decir, el operador $\hat{L}_c$ intercambia las funciones ψ_+ y ψ_-. Las funciones $\psi_\pm$ no son, evidentemente, eigenfunciones del operador $\hat{L}_c$. Por otro lado, ψ_a y ψ_s son ortogonales entre sí en el intervalo $(-\infty, \infty)$, al igual que ψ_+ y ψ_-, por lo que se tienen dos bases ortonormales equivalentes.

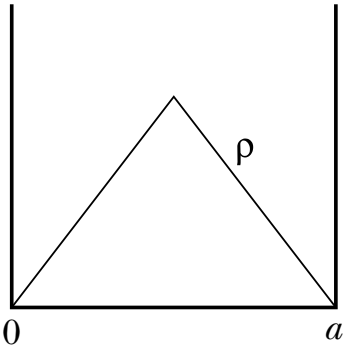


FIGURA III.1 *Distribución inicial de electrones para el problema III.4.*

* **III.4** Un pozo de potencial unidimensional de anchura a y profundidad infinita contiene electrones; en un momento dado, la densidad de los electrones es triangular y simétrica, como se ilustra en la figura III.1. Determine la constante de normalización y la densidad máxima de partículas.

Exprese la función de onda en términos de las eigenfunciones obtenidas en la sección 3.4 del texto para el pozo infinito. ¿Esperaría que este estado fuera estacionario? ¿Por qué?

La densidad está dada por la expresión

$$\rho\,(x) = \begin{cases} bx, & \text{si } 0 \le x \le a/2, \\ b(a-x), & \text{si } a/2 \le x \le a, \end{cases} \tag{III.24}$$

en donde la constante de normalización b se determina de la condición de normalización:

$$\int_0^a \rho\; dx = \tfrac{1}{4} b a^2 = 1 \Longrightarrow b = \frac{4}{a^2}.$$

La densidad máxima de partículas ocurre para $x = a/2$ y es $2/a$, es decir, el doble de lo que correspondería a una distribución uniforme.

Como $\sqrt{\rho}$ no corresponde a ninguna de las funciones propias de la ecuación estacionaria de Schrödinger para el pozo rectangular infinito, no se trata de un estado estacionario. En otras palabras, tomando la distribución dada como el estado inicial, la respectiva función de onda varía con el tiempo y se expresa como una superposición de las funciones propias del pozo infinito, con coeficientes dependientes del tiempo. La solución detallada de un problema similar pero más simple puede verse en el problema V.12. La solución completa del presente problema requiere del conocimiento de métodos que se estudian más adelante; como referencia para los lectores interesados, se procede aquí a su estudio detallado.

La función de onda del problema para un tiempo t arbitrario puede expresarse como una combinación lineal de las funciones propias del pozo infinito, por formar éstas una base. De hecho, se puede escribir (véase la ecuación (T5.7))

$$\psi\,(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n\,(x)\, e^{-iE_n t/\hbar}, \tag{III.25}$$

con $\varphi_n(x)$ las eigenfunciones para el pozo infinito, dadas por (T3.31)

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\operatorname{sen}\frac{n\pi x}{a}, \tag{III.26}$$

y E_n los correspondientes eigenvalores de la energía

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2. \tag{III.27}$$

Las constantes c_n pueden determinarse a partir del conocimiento de la función de onda inicial $\psi(x,0)$, como se muestra a continuación.

Supongamos que para $t = 0$ la densidad de probabilidad está representada por la figura III.1. Tomando a $\psi(x,0)$ como una función real (lo que sólo afecta una fase global irrelevante de la función de onda), podemos escribir

$$\psi\left(x,0\right) = \begin{cases} \dfrac{2}{a}\sqrt{x}, & 0 \leq x \leq \frac{a}{2}; \\ \\ \dfrac{2}{a}\sqrt{a-x}, & \frac{a}{2} \leq x \leq a. \end{cases} \tag{III.28}$$

Sustituyendo $t = 0$ en (III.25) se obtiene

$$\psi\left(x,0\right) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n\left(x\right). \tag{III.29}$$

Como las eigenfunciones son ortonormales y reales, se tiene que

$$\begin{aligned} c_n &= \int_0^a \varphi_n(x)\psi(x,0)\,dx \\ &= \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \left[\int_0^{a/2} \sqrt{x}\,\mathrm{sen}\,\frac{n\pi x}{a}\,dx + \int_{a/2}^{a} \sqrt{a-x}\,\mathrm{sen}\,\frac{n\pi x}{a}\,dx\right] \\ &= 2^{3/2}\left[\int_0^{1/2} \sqrt{u}\,\mathrm{sen}\,\pi n u\,du + \int_{1/2}^{1} \sqrt{1-u}\,\mathrm{sen}\,\pi n u\,du\right], \end{aligned} \tag{III.30}$$

donde se pasó a la variable adimensional $u = x/a$. En la segunda integral hacemos el cambio de variable $w = 1 - u$ y tomamos en cuenta que

$$\mathrm{sen}\left(\pi n - \pi n w\right) = (-1)^{n+1}\,\mathrm{sen}\,\pi n w;$$

obtenemos así

$$c_n = 2^{3/2}\left(1 - (-1)^n\right)\int_0^{1/2} \sqrt{u}\,\mathrm{sen}\,\pi n u\,du. \tag{III.31}$$

Luego los coeficientes c_n son nulos para n par. Para n impar tenemos, introduciendo la nueva variable $s = n\pi u$ e integrando por partes,

$$\begin{aligned} c_n = 4\sqrt{2}\int_0^{1/2} \sqrt{u}\,\mathrm{sen}\,\pi n u\,du &= -\frac{4}{n\pi}\cos\tfrac{1}{2}n\pi + \left(\frac{2}{\pi n}\right)^{3/2}\int_0^{n\pi/2} \frac{\cos s}{\sqrt{s}}\,ds \\ &= \left(\frac{2}{\pi n}\right)^{3/2}\sqrt{2\pi}C\left(\sqrt{\tfrac{1}{2}\pi n}\right), \end{aligned} \tag{III.32}$$

donde

$$C\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{x^2} \frac{\cos s}{\sqrt{s}}\,ds = \frac{2}{\sqrt{2\pi}}\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k\, x^{4k+1}}{(2k)!\,(4k+1)} \tag{III.33}$$

es la función coseno de Fresnel (Gradshteyn y Ryzhik (1980), sección 8.25). Para escribir la última igualdad de (III.32) se tomó en cuenta que $\cos\frac{1}{2}n\pi = 0$ para n impar. Sustituyendo en (III.25) se obtiene

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{4}{\pi}\sqrt{\frac{2}{a}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{C\left(\sqrt{\frac{1}{2}\pi n}\right)}{n^{3/2}}\operatorname{sen}\left(\frac{\pi n x}{a}\right)e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= \frac{4}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{C\left(\sqrt{\frac{1}{2}\pi n}\right)}{n^{3/2}}\varphi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}, \quad n=1,3,5,\ldots \qquad \text{(III.34)}\end{aligned}$$

III.5 Tres funciones propias ψ_1, ψ_2 y ψ_3 de algún operador son linealmente independientes y degeneradas, pero no necesariamente ortogonales. Construya a partir de ellas tres combinaciones lineales, ortogonales y normalizadas. Las nuevas funciones: ¿son eigenfunciones?, ¿son degeneradas?

El método de normalización de Gram-Schmidt permite construir a partir de un conjunto de funciones no ortogonales y linealmente independientes, un conjunto de funciones ortogonales sobre un intervalo arbitrario con respecto a un peso arbitrario o factor de densidad. En otras palabras, este proceso es equivalente a una transformación matricial que relaciona una base ortogonal con un conjunto no ortogonal de vectores. Como ilustración, aplicaremos este método al presente problema.

Sean:

$\{\psi_n(x)\}$ el sistema linealmente independiente, no ortogonal y no necesariamente normalizado,

$\{u_n(x)\}$ el sistema linealmente independiente, ortogonal y no normalizado,

$\{\varphi_n(x)\}$ el sistema linealmente independiente, ortogonal y normalizado.

La idea del procedimiento a seguir se ilustra en la figura III.2 para el caso de tres vectores. Empecemos con $n = 1$; para ello tomamos directamente, por ejemplo (y de manera arbitraria),

$$u_1(x) = \psi_1(x). \qquad \text{(III.35)}$$

Normalizando:

$$\varphi_1(x) = \frac{u_1(x)}{\int_{-\infty}^{\infty} u_1^*(x)\,u_1(x)\,dx} = \frac{\psi_1(x)}{\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*(x)\,\psi_1(x)\,dx}. \qquad \text{(III.36)}$$

Para $n = 2$ tomamos

$$u_2(x) = \psi_2(x) + a_{21}\varphi_1(x). \qquad \text{(III.37)}$$

Como $u_2(x)$ debe ser ortogonal a $\varphi_1(x)$, se debe cumplir $\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_1^*(x)\,u_2(x)\,dx = 0$, ó

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx + a_{21}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_1^*(x)\,\varphi_1(x)\,dx}_{1} = 0,$$

lo que significa que debemos tomar

$$a_{21} = -\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx. \qquad \text{(III.38)}$$

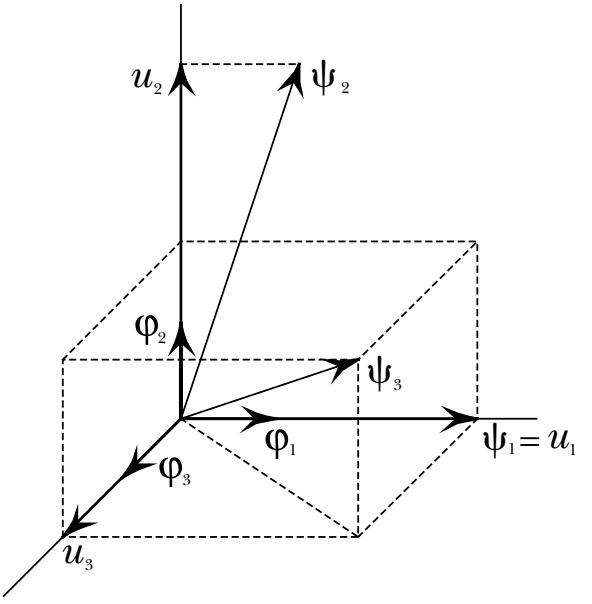


FIGURA III.2 *Obtención de una base ortonormal a partir de un conjunto de vectores arbitrarios por el método de Gram-Schmidt para el caso* n=*3.*

Finalmente se normaliza el vector:

$$\varphi_2(x) = \frac{u_2(x)}{\int_{-\infty}^{\infty} u_2^*(x)\, u_2(x)\, dx}.$$

Para $n = 3$ usamos una vez más el mismo procedimiento, tomando

$$u_3(x) = \psi_3(x) + a_{31}\varphi_1(x) + a_{32}\varphi_2(x). \tag{III.39}$$

La condición de que $u_3(x)$ sea ortogonal a $\varphi_1(x)$ da

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} u_3^*(x)\varphi_1(x)\,dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_3^*(x)\varphi_1(x)\,dx + a_{31}^* \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1^*(x)\varphi_1(x)\,dx \\ &\quad + a_{32}^* \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_2^*(x)\varphi_1(x)\,dx = 0,\end{aligned}$$

y como $\varphi_1(x)$ está normalizada y $\varphi_2(x)$ y $\varphi_1(x)$ son ortogonales,

$$a_{31} = -\int_{-\infty}^{\infty} \psi_3(x)\varphi_1^*(x)\,dx. \tag{III.40}$$

De forma análoga, la condición de que $u_3(x)$ y $\varphi_2(x)$ sean ortogonales conduce a

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} u_3^*(x)\varphi_2(x)\,dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_3^*(x)\varphi_2(x)\,dx + a_{31}^* \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1^*(x)\varphi_2(x)\,dx \\ &\quad + a_{32}^* \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_2^*(x)\varphi_2(x)\,dx = 0.\end{aligned}$$

De aquí que

$$a_{32} = -\int_{-\infty}^{\infty} \psi_3(x)\,\varphi_2^*(x)\,dx. \tag{III.41}$$

Normalizando,

$$\varphi_3(x) = \frac{u_3(x)}{\int_{-\infty}^{\infty} u_3^*(x)\, u_3(x)\, dx}.$$

Los resultados anteriores pueden expresarse, si se desea, en términos de las funciones originales, aunque no lo haremos aquí porque hacerlo no aporta nada nuevo.

Supongamos ahora que las $\psi_n(x)$ originales eran eigenfunciones degeneradas de un operador $\hat{L}$, de tal manera que

$$\hat{L}\psi_n(x) = \lambda_n \psi_n(x).$$

De aquí sigue que cualquier combinación lineal de las $\psi_n(x)$ es eigenfunción de $\hat{L}$ con el mismo eigenvalor, pues con $\varphi_n = \sum_k a_{nk}\psi_k(x)$ y $\lambda_k = \lambda$ se tiene

$$\hat{L}\varphi_n = \hat{L}\sum_k a_{nk}\psi_k = \sum_k a_{nk}\lambda_k\psi_k = \lambda\sum_k a_{nk}\psi_k = \lambda\varphi_n.$$

Como por hipótesis las funciones ψ_1, ψ_2 y ψ_3 son degeneradas, tendremos que tanto las funciones $u_n(x)$ como las funciones $\varphi_n(x)$ son eigenfunciones (degeneradas) de $\hat{L}$.

Debe observarse que el conjunto de funciones ortogonales que se construyó anteriormente no es único, sino que existe un número infinito de posibles conjuntos ortogonales que pueden construirse siguiendo el método anterior, pero cambiando la selección inicial (III.35). Sin embargo, se trata de meras trasformaciones lineales de una base a otra equivalente.

III.6 Se tienen partículas encerradas en una caja unidimensional de paredes infinitamente rígidas; el sistema se encuentra en un estado estacionario. Calcule el valor medio de x y x^2 como función de la energía.

Las eigenfunciones de la caja rígida son las de un pozo infinito unidimensional de anchura a, ecuación (III.26),

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\mathrm{sen}\,\frac{\pi n}{a}x \tag{III.42}$$

y la correspondiente densidad de probabilidad es

$$\rho_n = \frac{2}{a}\,\mathrm{sen}^2\,\frac{\pi n}{a}x. \tag{III.43}$$

Los respectivos eigenvalores de la energía están dados por la ecuación (III.27),

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2. \tag{III.44}$$

El valor medio de la posición de las partículas dentro del pozo en el estado n es entonces

$$\begin{aligned}\overline{x} &= \frac{2}{a}\int_0^a x\,\mathrm{sen}^2\,\frac{\pi n}{a}x\,dx \\ &= \frac{2}{a}\left(\frac{x^2}{4} - \frac{ax}{4\pi n}\,\mathrm{sen}\,\frac{2\pi n x}{a} - \frac{a^2}{8\pi^2 n^2}\cos\frac{2\pi n x}{a}\right)\Bigg|_0^a,\end{aligned}$$

o sea

$$\overline{x} = \frac{a}{2}. \tag{III.45}$$

Este resultado es intuitivamente claro y vale para todos los estados. Por otro lado,

$$\overline{x^2} = \frac{2}{a}\int_0^a x^2 \operatorname{sen}^2 \frac{\pi n}{a} x dx = \frac{a^2}{3}\left(1 - \frac{3}{2\pi^2 n^2}\right) = \frac{a^2}{3} - \frac{\hbar^2}{4mE_n}. \tag{III.46}$$

Comprobamos que para todos los niveles de energía, el valor de $\overline{x^2}$ se encuentra próximo a $a^2/3$. La dispersión de x resulta así

$$\sigma_x^2 = \overline{(x-\bar{x})^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2 = \frac{a^2}{12}\left(1 - \frac{6}{\pi^2 n^2}\right). \tag{III.47}$$

En el límite $n \to \infty$ la dispersión se reduce a $a^2/12$ que coincide con el valor para partículas uniformemente distribuidas en el interior de la caja.

De los resultados anteriores es posible obtener información sobre la dispersión del momento lineal, pues como el potencial es nulo en todo el interior, se tiene en cada eigenestado

$$\overline{p^2} = 2mE_n,$$

y como consideraciones de simetría conducen a $\bar{p} = 0$, sigue que

$$\sigma_p^2 = \overline{(p-\bar{p})^2} = \overline{p^2} - \overline{p}^2 = \overline{p^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{a^2} n^2. \tag{III.48}$$

Nótese que el producto $\sigma_x^2 \sigma_p^2$ es independiente del parámetro a, por lo que resulta ser el mismo para todos los pozos del mismo tipo:

$$\sigma_x^2 \sigma_p^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{12}\left(n^2 - \frac{6}{\pi^2}\right). \tag{III.49}$$

Es interesante comparar los resultados anteriores con los correspondientes al respectivo problema clásico. En este último caso la distribución de partículas en el interior del pozo se considera uniforme y la magnitud del momento lineal permanece constante entre los rebotes elásticos. Se tiene entonces

$$\overline{x^2} = \frac{1}{a}\int_0^a x^2 dx = \frac{a^2}{3}, \tag{III.50}$$

$$\overline{p^2} = 2mE. \tag{III.51}$$

Como $\bar{x} = a/2$, sigue que

$$\sigma_{x\,\text{clás}}^2 = \frac{a^2}{12}. \tag{III.52}$$

Vemos que $\sigma_x^2 < \sigma_{x\,\text{clás}}^2$ para todos los estados con n finita (esto se debe a que se reduce la dispersión al anular las funciones de onda sobre las paredes), y que sólo cuando $n \to \infty$ el valor clásico y el cuántico coinciden. Por otra parte, para el caso clásico se cumple la misma relación $\sigma_p^2 = 2mE$, sólo que con E arbitraria.

III.2. Problemas adicionales

III.7 Compruebe que las eigenfunciones de la partícula en un pozo cuadrado infinito no son funciones propias del operador $\hat{O} = -i\hbar\,(d/dx)$.

Aplicando el operador $\hat{O}$ a las eigenfunciones (III.42) que describen los estados estacionarios de partículas en un pozo rectangular infinito, se obtiene

$$-i\hbar\frac{d\varphi_n\,(x)}{dx} = -i\hbar\frac{\pi n}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{\pi n x}{a},$$

resultado que no tiene la forma de la ecuación de eigenvalores

$$-i\hbar\frac{d}{dx}\varphi_n\,(x) = \lambda\varphi_n\,(x)\,.$$

Esto muestra que las $\varphi_n\,(x)$ no son eigenfunciones del operador $-i\hbar d/dx$. En el capítulo VII veremos que este operador es muy importante y que el resultado recién demostrado significa que las funciones φ_n no corresponden a momento lineal determinado.

III.8 Considere un conjunto de partículas que se mueven en un pozo de potencial de anchura a y paredes infinitas. Escriba la función de onda $\psi\,(x,t)$ que las describe, para el caso en que para el tiempo $t = 0$ la probabilidad de que la energía del sistema sea E_1 o E_2 es $1/2$. Determine asimismo $|\psi\,(x,t)|^2$ y el valor medio de x.

La función de onda para $t = 0$ es

$$\psi\,(x,0) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_1\,(x) + \varphi_2\,(x)\right], \tag{III.53}$$

con

$$\varphi_1\,(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\mathrm{sen}\,\frac{\pi x}{a}, \quad \varphi_2\,(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\mathrm{sen}\,\frac{2\pi x}{a}.$$

Escribiendo como en el problema III.4

$$\psi\,(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\varphi_n\,(x)\,, \tag{III.54}$$

los únicos coeficientes diferentes de cero son

$$c_1 = c_2 = \tfrac{1}{\sqrt{2}}, \tag{III.55}$$

por lo que la expresión general, válida para todo tiempo, (T5.7) o (III.25)

$$\psi\,(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\varphi_n\,(x)\,e^{-iE_n t/\hbar}, \tag{III.56}$$

se reduce a

$$\psi\,(x,t) = \frac{1}{\sqrt{a}}\left(e^{-iE_1 t/\hbar}\,\mathrm{sen}\,\frac{\pi x}{a} + e^{-iE_2 t/\hbar}\,\mathrm{sen}\,\frac{2\pi x}{a}\right), \tag{III.57}$$

con

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad E_2 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}.$$

La densidad de probabilidad para el tiempo t es

$$\begin{aligned}|\psi(x,t)|^2 &= \frac{1}{a}\left(\operatorname{sen}^2\frac{\pi x}{a}+\operatorname{sen}\frac{\pi x}{a}\operatorname{sen}\frac{2\pi x}{a}e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}\right.\\ &\quad\left.+\operatorname{sen}\frac{\pi x}{a}\operatorname{sen}\frac{2\pi x}{a}e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}+\operatorname{sen}^2\frac{2\pi x}{a}\right)\\ &= \frac{1}{a}\left(\operatorname{sen}^2\frac{\pi x}{a}+\operatorname{sen}^2\frac{2\pi x}{a}+2\operatorname{sen}\frac{\pi x}{a}\operatorname{sen}\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}\right).\end{aligned} \tag{III.58}$$

El valor medio de la posición es

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \int_0^a \psi^*(x,t)x\psi(x,t)\,dx\\ &= \frac{1}{a}\left[\int_0^a x\operatorname{sen}^2\frac{\pi x}{a}\,dx+2\cos\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}\int_0^a x\operatorname{sen}\frac{\pi x}{a}\operatorname{sen}\frac{2\pi x}{a}\,dx\right.\\ &\quad\left.+\int_0^a x\operatorname{sen}^2\frac{2\pi x}{a}\,dx\right]\\ &= \frac{1}{a}\left[\frac{a^2}{2}-\frac{16}{9}\frac{a^2}{\pi^2}\cos\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}\right],\\ \bar{x} &= \frac{a}{2}-\frac{16}{9}\frac{a}{\pi^2}\cos\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}.\end{aligned} \tag{III.59}$$

Vemos que $\bar{x}$ oscila con frecuencia $\omega=(E_2-E_1)/\hbar$ alrededor del punto medio $a/2$.

III.9 Demuestre que la función

$$\Sigma(\eta)=\int\psi^*(x)(x-\eta)^2\psi(x)dx$$

tiene un mínimo para $\eta=\bar{x}$.

Escribimos, sumando y restando la constante arbitraria a en el integrando,

$$\begin{aligned}\Sigma(\eta) &= \int\psi^*(x-\eta)^2\psi dx=\int\psi^*(x-a+a-\eta)^2\psi dx\\ &= \overline{(x-a)^2}+(a-\eta)^2+2(\bar{x}-a)(a-\eta).\end{aligned}$$

El mínimo de esta expresión como función de η ocurre para η solución de la ecuación

$$-2(a-\eta)-2(\bar{x}-a)=0,$$

es decir, $\eta=\bar{x}$, lo que da $\Sigma_{\text{mín}}=\Sigma(\bar{x})=\overline{(x-\bar{x})^2}$, la variancia de x. Así, la variancia es la mínima desviación cuadrática media, mínimo que ocurre para el valor medio de la variable.

III.3. Ejercicios

III.10 Calcule la transformada de Fourier de un pulso rectangular de altura h y ancho d, centrado en $t=0$. Verifique que el espectro no contiene las frecuencias $2\pi n/d$.

III.11 Investigue qué tan realista puede ser modelar un átomo de hidrógeno con un pozo rectangular infinito unidimensional, suponiendo que la línea de emisión de 1216 Å (que pertenece a la serie de Lyman, en el ultravioleta) ocurre debido a una transición del nivel $n = 2$ al nivel $n = 1$. Utilice esta hipótesis para estimar el diámetro del átomo y compárelo con el valor correcto 1.06 Å.

III.12 Considere las funciones gaussiana $F(x)$ y su transformada de Fourier $\tilde{F}(k)$ dadas en el inciso d) del problema III.2, y utilícelas para determinar la dispersión de las variables ("conjugadas") x y k. Observe que se cumple el importante resultado $\sigma_x^2\sigma_k^2 = 1$. Considere ahora el paquete de ondas estudiado en el inciso b) del mismo problema y estime las correspondientes dispersiones, para mostrar que vale una relación similar a la anterior.

III.13 En la ecuación de eigenvalores $\hat{L}\varphi(x_1, x_2) = \lambda\varphi(x_1, x_2)$ el operador $\hat{L}$ intercambia las variables x_1 y x_2. Determine qué propiedad general poseen las eigenfunciones de este problema y cuáles son los posibles valores propios.

III.14 Un problema importante en mecánica cuántica es el de la partícula sujeta a una fuerza lineal restitutiva (el oscilador armónico). La ecuación de Schrödinger estacionaria para este problema, en una dimensión, tiene la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + \frac{1}{2}kx^2\varphi = E\varphi.$$

Se proponen soluciones de los siguientes tipos:

a) $\varphi = A_1 \exp(ax^2) + A_2 \exp(-ax^2)$, con a real y positiva,

b) $\varphi = (B_1 + B_2x) \exp(-bx^2)$, con b real y positiva.

Encuentre los valores que deben tener las constantes A_i, B_i, a y b para que estas funciones sean soluciones físicamente aceptables y estén normalizadas a la unidad. Encuentre el valor de E en cada caso.

III.15 De acuerdo con el principio de correspondencia, los resultados de la teoría cuántica deben coincidir con los correspondientes de la física clásica en el límite de números cuánticos muy grandes. Demuestre que cuando $n \to \infty$ la probabilidad de encontrar a la partícula en un pozo de potencial infinito en un punto entre x y $x + dx$ es independiente de x, tal como predice la física clásica.

III.16 Determine las funciones que satisfacen la ecuación de valores propios

$$\hat{A}f(x) = \lambda f(x),$$

cuando $\hat{A}$ es el operador que al aplicarse a una función la eleva al cuadrado.

III.17 Considere una función $f(x)$ que puede ser integrada dos veces, y $\tilde{f}(k)$ su transformada de Fourier. Exprese la transformada de Fourier de $df(x)/dx$ y de $xf(x)$ en términos de $\tilde{f}(k)$.

IV. La partícula libre

IV.1. Problemas del texto

IV.1 Demuestre detalladamente las siguientes propiedades de la función delta de Dirac:

a) $\delta(x) = \delta(-x)$;

b) $a\delta(ax) = \delta(x), \quad a > 0$;

c) $\delta\left(x^2 - a^2\right) = \dfrac{1}{2a}\left[\delta(x-a) + \delta(x+a)\right]$;

d) $\delta[f(x)] = \sum_i \dfrac{\delta(x - x_i)}{|f'(x_i)|}$, donde x_i son las raíces de f, $f(x_i) = 0$.

En el caso unidimensional la delta de Dirac se define como aquella función que posee las siguientes propiedades:

$$\delta(x) = 0, \quad \forall \quad x \neq 0, \tag{IV.1}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\, dx = 1, \tag{IV.2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)\, dx = f(0). \tag{IV.3}$$

Recuérdese que, más que de una función, se trata de una distribución cuyas propiedades están bien definidas cuando aparece bajo un signo de integración, como es el caso en (IV.2) y (IV.3).

a) Consideremos una función $f(x)$ integrable, pero arbitraria por lo demás. Un cambio de variable permite escribir, usando repetidamente (IV.3),

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(-x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} f\left(-x'\right)\delta\left(x'\right)\,dx' = f(0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x)\,dx;$$

puesto que $f(x)$ es arbitraria, sigue que

$$\delta(x) = \delta(-x). \tag{IV.4}$$

b) Tomamos $a > 0$ para escribir, con $y = ax$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(ax)\;dx = \frac{1}{a}\int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{y}{a}\right)\delta(y)\,dy = \frac{1}{a}f(0) = \frac{1}{a}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x)\;dx,$$

de donde sigue que

$$\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x). \tag{IV.5}$$

En el caso $a < 0$ el cambio de variable $y = ax$ intercambia los límites de integración de la expresión anterior,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(ax)\,f(x)\;dx = \frac{1}{a}\int_{\infty}^{-\infty} \delta(y)\,f\left(\frac{y}{a}\right)\;dy = -\frac{1}{a}f(0),$$

por lo que podemos escribir en general

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x), \qquad a \neq 0. \tag{IV.6}$$

c) Factorizando el argumento en

$$\delta\left(x^2 - a^2\right) = \delta\left[(x+a)(x-a)\right]$$

notamos que $\delta\left(x^2 - a^2\right)$ sólo es distinta de cero en los puntos $x = \pm a$. Por lo tanto,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(x^2 - a^2\right) f(x)\,dx &= \int_{-a-\varepsilon}^{-a+\varepsilon} \delta\left[(x+a)(x-a)\right] f(x)\,dx \\ &\quad + \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta\left[(x+a)(x-a)\right] f(x)\,dx,\end{aligned} \tag{IV.7}$$

donde $0 < \varepsilon < 2a$ y ε puede ser arbitrariamente pequeña. En la vecindad de $x = -a$ el factor $x - a$ puede reemplazarse por $-2a$ en la primera integral, lo que permite escribir

$$\begin{aligned}\int_{-a-\varepsilon}^{-a+\varepsilon} \delta\left[(x+a)(x-a)\right] f(x)\,dx &= \int_{-a-\varepsilon}^{-a+\varepsilon} \delta\left[-2a(x+a)\right] f(x)\,dx \\ &= \int_{-a-\varepsilon}^{-a+\varepsilon} \delta\left[2a(x+a)\right] f(x)\,dx \\ &= \frac{1}{2a}\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x+a) f(x)\,dx,\end{aligned}$$

en donde se corrieron los límites de integración recurriendo a la propiedad (IV.1) y se utilizó (IV.6). De forma análoga se demuestra que

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta\left[(x+a)(x-a)\right] f(x)\;dx = \frac{1}{2a}\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)\,f(x)\;dx.$$

Combinando ambos resultados en (IV.7) queda

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(x^2 - a^2\right) f(x)\;dx = \frac{1}{2a}\left[\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x+a)\,f(x)\;dx + \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)\,f(x)\;dx\right],$$

que convencionalmente se escribe en la forma

$$\delta\left(x^2-a^2\right)=\frac{1}{2a}\left[\delta\left(x-a\right)+\delta\left(x+a\right)\right]. \tag{IV.8}$$

d) Sea ahora otra función integrable $g\left(x\right)$ arbitraria, y consideremos la integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} g\left(x\right)\delta\left(f\left(x\right)\right)\,dx.$$

Con el cambio de variable $y=f(x)$ tenemos que $dy=f'(x)\,dx$, y queda

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} g(x)\delta\left(f(x)\right)\,dx &= \int_{y=f(-\infty)}^{y=f(\infty)} \frac{h(y)}{f'\left(x(y)\right)}\delta(y)\,dy \\ &= \sum_i \left.\frac{h(y)}{f'(x)}\right|_{x_i},\end{aligned}$$

donde $h(y)=g(x(y))$ y x_i son los puntos para los cuales $f\left(x_i\right)=0$. Luego,

$$\int_{-\infty}^{\infty} g\left(x\right)\delta\left(f\left(x\right)\right)\,dx=\sum_i \left.\frac{g\left(x\right)}{f'\left(x\right)}\right|_{x_i}.$$

Ahora usamos las propiedades de la delta de Dirac para escribir

$$\sum_i \left.\frac{g\left(x\right)}{f'\left(x\right)}\right|_{x_i} =\sum_i \int_{-\infty}^{\infty}\frac{g\left(x\right)}{f'\left(x\right)}\delta\left(x-x_i\right)\,dx=\int_{-\infty}^{\infty} g\left(x\right)\delta\left[f\left(x\right)\right]\,dx.$$

Considerando que $g(x)$ es arbitraria, esto equivale a

$$\delta\left[f\left(x\right)\right]=\sum_i \frac{\delta\left(x-x_i\right)}{\left|f'\left(x_i\right)\right|},\qquad \text{con } x_i \text{ tal que } f\left(x_i\right)=0. \tag{IV.9}$$

Con lo anterior, quedan demostradas las propiedades solicitadas. Otra propiedad importante de la delta de Dirac es la siguiente, que equivale a una interpretación de sus derivadas:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta^{(n)}(x)dx=(-1)^n f^{(n)}(0). \tag{IV.10}$$

Esta expresión se puede demostrar integrando por partes (tratando a $\delta^{(n)}(x)$ bajo el signo de integración como a una función ordinaria):

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta'(x)dx=\left.f(x)\delta(x)\right|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty} f'(x)\delta(x)dx=-f'(0)$$

y repitiendo el proceso n veces.

Es usual considerar a la delta de Dirac como la derivada de la función de Heaviside $H(x)$ definida por

$$H(x)=\begin{cases}1, & \text{si } x>0;\\ 0, & \text{si } x<0.\end{cases} \tag{IV.11}$$

Para ver esto, consideremos la siguiente integral de Stieltjes para una $f(x)$ integrable,[1]

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dH(x) = f(0). \tag{IV.12}$$

Comparando con la ecuación (IV.3) se establece la equivalencia $dH(x) \to \delta(x)dx$. Esto revela que la delta de Dirac, más que una función, es una medida de Stieltjes. Su uso extendido en la física es una manera práctica de efectuar integrales en el sentido de Stieltjes.

IV.2 Demuestre que

$$\lim_{a\to 0^+} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx-a|k|}\, dk = \delta\left(x\right).$$

Para $x \neq 0$, el integrando es una función que oscila, de tal forma que las contribuciones positivas y negativas a la integral se cancelan mutuamente si a es suficientemente pequeña; por otro lado, cuando $x = 0$ y $a \to 0$ el integrando es igual a la unidad, por lo que la integral tiende a infinito. Así pues, se cumple una de las propiedades más importantes de la función delta de Dirac.

Para investigar el tipo de singularidad de que se trata procedemos como sigue. Notamos primero que para $a > 0$,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx-a|k|}dk &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{0} e^{ikx+ak}\, dk + \int_{0}^{\infty} e^{ikx-ak}dk \\ &= \frac{1}{2\pi}\left\{\frac{1}{ix+a} - \frac{1}{ix-a}\right\}, \end{aligned}$$

de tal forma que

$$\lim_{a\to 0^+} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx-a|k|}\, dk = \lim_{a\to 0} \frac{1}{\pi}\frac{a}{x^2+a^2} = \delta\left(x\right), \tag{IV.13}$$

en donde hemos identificado una de las expresiones más conocidas y útiles de la delta de Dirac. Como

$$\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{a}{x^2+a^2}\, dx = \frac{1}{\pi}\tan^{-1}\frac{x}{a}\,|_{-\infty}^{\infty} = 1,$$

verificamos que la expresión del lado izquierdo en la ecuación (IV.13) satisface todas las propiedades de la delta de Dirac, lo que legitimiza el identificarla con ésta. Incidentalmente, nótese la siguiente fórmula integral, muy útil en las aplicaciones,

$$\frac{a}{\pi}\lim_{a\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x^2+a^2}\, dx = f(0). \tag{IV.14}$$

IV.3 Demuestre que la distribución normal

$$\rho(x,\sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(x-a)^2/2\sigma^2}$$

tiene la propiedad

$$\lim_{\sigma\to 0} \rho(x,\sigma) = \delta(x-a).$$

[1] Véase por ejemplo Byron (1976), p. 279.

Esta propiedad fue observada cualitativamente en el problema II.5, donde se vio que en el límite $\sigma \to 0$, $\rho(x) = 0$ si $x \neq a$, pero $\rho(x) = \infty$ si $x = a$. Para concluir la demostración basta tomar una función integrable arbitraria $f(x)$ y considerar la integral

$$\lim_{\sigma \to 0^+} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-(x-a)^2/2\sigma^2} dx = f(a). \tag{IV.15}$$

Para llegar a este resultado se observó que con $\sigma > 0$ pero arbitrariamente pequeña, el exponencial es despreciable para toda $x \neq a$, por lo que sólo hay contribución a la integral en una pequeña vecindad de $x = a$. Podemos entonces aproximar $f(x)$ por la constante $f(a)$, lo que da (IV.15) debido a que $\rho(x, \sigma)$ está normalizada a la unidad.

IV.4 Considere el teorema (T4.22) del texto (para n dimensiones):

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{|J(x_i, \xi_i)|} \delta(\xi_1 - \xi_1') \cdots \delta(\xi_n - \xi_n').$$

Cuando el jacobiano se anula, la transformación de x_i a ξ_i deja de ser uno a uno. Por ejemplo, en el origen de un sistema plano polar, $x = y = 0$ y $r = 0$, pero θ tiene un valor arbitrario. Una coordenada que no tiene valor determinado en un punto singular de una transformación (un punto para el que se anula el jacobiano) se llama variable ignorable.

Demuestre que, si hay variables ignorables, la ecuación de arriba debe cambiarse por

$$\delta(x_1 - x_{01}) \cdots \delta(x_n - x_{0n}) = \frac{\delta(\xi_1 - \beta_1) \cdots \delta(\xi_k - \beta_k)}{|J_k|},$$

donde ξ_i, $i = 1, 2, 3, \ldots, k$ son las variables no ignorables y $|J_k| = \int \cdots \int |J|\, d\xi_{k+1} \cdot \cdots d\xi_n$, donde J es el jacobiano de la transformación y la integral se realiza sobre las variables ignorables.

En un espacio cartesiano de tres dimensiones, la función delta de Dirac puede escribirse como

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \delta(x_1 - x_{01})\, \delta(x_2 - x_{02})\, \delta(x_3 - x_{03}),$$

con

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x_1 - x_{01})\, \delta(x_2 - x_{02})\, \delta(x_3 - x_{03})\; dx_1 dx_2 dx_3 = 1.$$

Análogamente, para n dimensiones

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x_1 - x_{01})\, \delta(x_2 - x_{02}) \cdots \delta(x_n - x_{0n})\, dx_1 dx_2 \cdots\; dx_n = 1.$$

Al hacer la transformación $\{x_i\} \to \{\xi_i\}$, el elemento de volumen toma la forma

$$dx_1\, dx_2 \cdots\; dx_n = |J|\; d\xi_1 d\xi_2 \cdots d\xi_n, \tag{IV.16}$$

donde J es el jacobiano de la transformación. Así queda:

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x_1 - x_{01}) \cdots \delta(x_n - x_{0n})\, dx_1 \cdots\; dx_n \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x_1 - x_{01}) \cdots \delta(x_n - x_{0n})\; |J|\; d\xi_1 \cdots d\xi_n = 1. \end{aligned} \tag{IV.17}$$

Por otra parte, en cualquier espacio debe satisfacerse

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\delta\left(\xi_1-\beta_1\right)\delta\left(\xi_2-\beta_2\right)\cdots\delta\left(\xi_n-\beta_n\right)\,d\xi_1 d\xi_2\cdots d\xi_n=1. \quad \text{(IV.18)}$$

De estas dos expresiones sigue que

$$\delta\left(x_1-x_{01}\right)\delta\left(x_2-x_{02}\right)\cdots\delta(x_n-x_{0n})=\frac{\delta\left(\xi_1-\beta_1\right)\cdots\delta\left(\xi_n-\beta_n\right)}{|J|}, \quad \text{(IV.19)}$$

que es la expresión (T4.22). Las β_i corresponden a las x_{0i} en el sistema de coordenadas transformado.

Sea ahora $(x_{01}, x_{02}, \ldots, x_{0n})$ un punto (singular) donde $|J| = 0$, de tal forma que $x_{0i} \to \beta_i$ para $i = 1, 2, \ldots, k$ están definidas, pero no para $i = k+1, \ldots, n$; es decir, $\xi_{k+1}, \ldots, \xi_n$ son ignorables. La igualdad

$$\int\cdots\int\delta\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0\right)|J|\;d\xi_1 d\xi_2\ldots d\xi_n=1$$

continúa siendo válida, pero $\delta\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0\right)=\varphi\left(\xi_1,\ldots,\xi_k\right)$ es una función sólo de las primeras k variables, por ser el resto ignorables. Entonces:

$$\begin{array}{rcl} 1 & = & \int\cdots\int\varphi\left(\xi_1,\ldots,\xi_k\right)|J|\;d\xi_1 d\xi_2\ldots d\xi_k d\xi_{k+1}\ldots d\xi_n \\ & = & \int\cdots\int\varphi\left(\xi_1,\ldots,\xi_k\right)d\xi_1 d\xi_2\ldots d\xi_k\int\cdots\int|J|\,d\xi_{k+1}\ldots d\xi_n \\ & = & \int\cdots\int\varphi\left(\xi_1,\ldots,\xi_k\right)|J_k|\;d\xi_1 d\xi_2\ldots d\xi_k \\ & = & \int\cdots\int\delta\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0\right)|J_k|\;d\xi_1 d\xi_2\ldots d\xi_k, \end{array} \quad \text{(IV.20)}$$

donde hemos definido

$$|J_k|=\int\cdots\int|J|\;d\xi_{k+1}\ldots d\xi_n. \quad \text{(IV.21)}$$

Como

$$\int\cdots\int\delta\left(\xi_1-\beta_1\right)\delta\left(\xi_2-\beta_2\right)\ldots\delta\left(\xi_k-\beta_k\right)d\xi_1 d\xi_2\ldots d\xi_k=1,$$

combinando con (IV.20) se obtiene

$$\delta\left(x_1-x_{01}\right)\cdots\delta\left(x_n-x_{0n}\right)=\frac{\delta\left(\xi_1-\beta_1\right)\cdots\delta\left(\xi_k-\beta_k\right)}{|J_k|}, \quad \text{(IV.22)}$$

que es lo que se debía demostrar.

IV.5 Demuestre que en el plano podemos escribir

$$\delta\left(x-x_0\right)\delta(y-y_0)=\frac{\delta\left(r-r_0\right)\delta\left(\theta-\theta_0\right)}{r}\quad\left(r_0\neq 0\right),$$

en donde r y θ son las variables polares. En el origen, θ es ignorable. Demuestre que en este punto se debe escribir

$$\delta\left(x\right)\delta(y)=\frac{\delta\left(r\right)}{2\pi r}.$$

Las coordenadas polares están definidas por

$$x = r\cos\theta, \qquad y = r\,\mathrm{sen}\,\theta,$$

con lo que resulta

$$|J| = r. \tag{IV.23}$$

De los resultados del ejercicio anterior sigue que

$$\delta(x - x_0)\,\delta(y - y_0) = \frac{\delta(r - r_0)\,\delta(\theta - \theta_0)}{r}, \quad r_0 \neq 0. \tag{IV.24}$$

Ahora bien, en el origen la variable θ es ignorable, pero los resultados del problema anterior nos permiten escribir

$$\delta(x)\,\delta(y) = \frac{\delta(r)}{|J_r|},$$

con $|J_r| = \int_0^{2\pi} |J|\,d\theta = 2\pi r$. Por lo tanto,

$$\delta(x)\,\delta(y) = \frac{\delta(r)}{2\pi r}. \tag{IV.25}$$

IV.6 Demuestre que en el espacio tridimensional podemos escribir

$$\delta(x - x_0)\,\delta(y - y_0)\delta(z - z_0) = \frac{\delta(r - r_0)\delta(\theta - \theta_0)\,\delta(\varphi - \varphi_0)}{r^2\,\mathrm{sen}\,\theta} \quad (r_0,\ \theta_0 \neq 0),$$

en donde r, θ y φ son las variables polares esféricas. Si $x_0 = y_0 = 0$, entonces $\theta = 0$ y φ es ignorable; demuestre que en este caso debe escribirse

$$\delta(x)\,\delta(y)\delta(z - z_0) = \frac{\delta(r - r_0)\,\delta(\theta)}{2\pi r^2\,\mathrm{sen}\,\theta}.$$

Si $x_0 = y_0 = z_0 = 0$, entonces θ y φ son ambas ignorables; demuestre que en este caso se tiene que

$$\delta(x)\,\delta(y)\delta(z) = \frac{\delta(r)}{4\pi r^2}.$$

En un espacio tridimensional las coordenadas esféricas están definidas por

$$x = r\,\mathrm{sen}\,\theta\cos\varphi, \qquad y = r\,\mathrm{sen}\,\theta\,\mathrm{sen}\,\varphi, \qquad z = r\cos\theta$$

y el jacobiano de la transformación es

$$J = r^2\,\mathrm{sen}\,\theta.$$

Utilizando los resultados del problema IV.4, se obtiene

$$\delta(x - x_0)\,\delta(y - y_0)\delta(z - z_0) = \frac{\delta(r - r_0)\,\delta(\theta - \theta_0)\,\delta(\varphi - \varphi_0)}{r^2\,\mathrm{sen}\,\theta}, \quad (r_0,\ \theta_0 \neq 0). \tag{IV.26}$$

Ahora bien, para $x_0 = y_0 = 0$ la variable θ se anula y φ es una coordenada ignorable, por lo que debe usarse $|J_{r\theta}|$, donde

$$|J_{r\theta}| = \int_0^{2\pi} |J|\ d\varphi = 2\pi r^2\,\mathrm{sen}\,\theta, \tag{IV.27}$$

lo que conduce a

$$\delta(x)\,\delta(y)\delta(z-z_0)=\frac{\delta(r-r_0)\,\delta(\theta)}{2\pi r^2\,\mathrm{sen}\,\theta}. \tag{IV.28}$$

Cuando θ y φ son ambas coordenadas ignorables (lo que ocurre en el origen), debe emplearse $|J_r|$, definida por

$$|J_r|=\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}|J|\;d\theta d\varphi=4\pi r^2. \tag{IV.29}$$

Resulta entonces

$$\delta(x)\,\delta(y)\delta(z)=\frac{\delta(r)}{4\pi r^2}. \tag{IV.30}$$

IV.7 Demuestre que si al potencial de la ecuación estacionaria de Schrödinger se le agrega una constante, las soluciones no se modifican. Discuta el efecto de esta propiedad en los eigenvalores de la energía de la partícula libre.

Si al potencial en la ecuación estacionaria de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi+V(x)\,\varphi=E\varphi \tag{IV.31}$$

se le agrega la constante C, la ecuación se transforma en

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi+V(x)\,\varphi=(E-C)\,\varphi.$$

Definiendo la nueva energía $E'=E-C$ se obtiene la nueva ecuación de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi+V(x)\,\varphi=E'\varphi. \tag{IV.32}$$

Como ambas ecuaciones (IV.31) y (IV.32) tienen la misma forma, sus soluciones son comunes. Luego lo único que se modifica son los eigenvalores correspondientes de la energía, pues ahora están dados por $E_n=E'_n+C$, es decir, se han desplazado por la cantidad C. En particular, en el caso de la partícula libre el continuo inicial de valores para E dentro del intervalo $[0,\infty)$ se desplaza a $[C,\infty)$.

IV.8 Muestre que para cualquier paquete de partículas libres se cumple que

$$\overline{x(t)}=\overline{x(t_0)}+\overline{v}\,(t-t_0)\,.$$

De los resultados de la sección 4.5 del texto sigue que el paquete general de partículas libres se puede escribir en la forma

$$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ik(x-x')-iD(t-t_0)k^2}\psi_0\left(x'\right)\,dx'dk, \tag{IV.33}$$

donde se ha puesto

$$k=\frac{p}{\hbar},\qquad D=\frac{\hbar}{2m}, \tag{IV.34}$$

y $\psi_0(x)=\psi(x,t_0)$ representa la amplitud (inicial) al tiempo t_0, totalmente arbitraria. Integrando sobre la variable k obtenemos la correspondiente expresión en términos del propagador de partícula libre:

$$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\pi}{iD(t-t_0)}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i(x-x')^2/4D(t-t_0)}\,\psi_0\left(x'\right)\,dx'. \tag{IV.35}$$

Partiremos de esta expresión para investigar la forma general de $\overline{x(t)}$ para la partícula libre.

Vamos a resolver el problema siguiendo dos procedimientos diferentes. En la primera versión calculamos directamente $\overline{x(t)}$. Tenemos:

$$\begin{aligned}\overline{x(t)} &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)x\psi(x,t)dx \\ &= \frac{1}{4\pi^2}\frac{\pi}{D\,(t-t_0)}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dx'\int_{-\infty}^{\infty}dx''\psi_0^*\left(x'\right)\psi_0\left(x''\right)x \\ &\quad\times e^{-i(x-x')^2/4D(t-t_0)}e^{i(x-x'')^2/4D(t-t_0)}. \end{aligned} \tag{IV.36}$$

El exponente del integrando es $(i/4D(t-t_0))\left[-x'^2+x''^2+2x(x'-x'')\right]$, por lo que la integral sobre x es

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}xe^{ix(x'-\,x'')/2D(t-t_0)}dx &= -2iD(t-t_0)\frac{\partial}{\partial x'}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ix(x'-\,x'')/2D(t-t_0)}dx \\ &= -8\pi iD^2(t-t_0)^2\frac{\partial}{\partial x'}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{iy(x'-\,x'')}dy \\ &= -8\pi iD^2(t-t_0)^2\delta'(x'-x''), \end{aligned} \tag{IV.37}$$

en donde se hizo un cambio de variable y se usó la representación fundamental de la delta de Dirac:

$$\delta(x-a)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ik(x-a)}dk. \tag{IV.38}$$

Sustituyendo, queda

$$\begin{aligned}\overline{x(t)} &= -2iD\,(t-t_0)\int_{-\infty}^{\infty}dx'\int_{-\infty}^{\infty}dx''\psi_0^*\left(x'\right)\psi_0\left(x''\right) \\ &\quad\times e^{-i(x'^2-x''^2)/4D(t-t_0)}\delta'(x'-x'') \\ &= -2iD\,(t-t_0)\int_{-\infty}^{\infty}dx'\int_{-\infty}^{\infty}dx''\psi_0^*\left(x'\right)e^{-i(x'^2-x''^2)/4D(t-t_0)} \\ &\quad\times\left[\frac{\partial\psi_0\left(x''\right)}{\partial x''}+\frac{ix''\psi_0\left(x''\right)}{2D\,(t-t_0)}\right]\delta(x'-x''), \end{aligned}$$

después de una integración por partes. Integrando sobre x'' y desarrollando con ayuda de (IV.34),

$$\overline{x(t)}=\frac{-i\hbar}{m}\,(t-t_0)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*\left(x'\right)\frac{\partial\psi_0\left(x'\right)}{\partial x'}dx'+\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*\left(x'\right)x'\psi_0\left(x'\right)dx'. \tag{IV.39}$$

En la segunda integral se reconoce fácilmente el valor medio de la posición inicial, $\overline{x(t_0)}$. Por lo tanto, la ecuación (IV.39) sugiere identificar la velocidad promedio del paquete con

$$\overline{v(t)}=\frac{\overline{(x(t)-x(t_0))}}{t-t_0}=\frac{\overline{x(t)}-\overline{x(t_0)}}{t-t_0}=\frac{-i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*\left(x\right)\frac{\partial\psi_0\left(x\right)}{\partial x}dx, \tag{IV.40}$$

lo que conduce precisamente a la relación pedida:

$$\overline{x(t)}=\overline{x(t_0)}+\bar{v}(t-t_0). \tag{IV.41}$$

El resultado que acabamos de obtener es sumamente importante; muestra que el momento medio de las partículas libres que conforman el paquete se puede obtener usando la siguiente expresión, que sigue directamente de (IV.40):

$$\overline{p(t)} = m\overline{v(t)} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \frac{\partial \psi_0(x)}{\partial x} dx. \tag{IV.42}$$

Más adelante (en el capítulo VIII) se verá que este procedimiento no se restringe a las partículas libres, sino que se aplica en todos los casos. Ésta es precisamente la base del segundo método de cálculo, al que pasamos a continuación.

Adelantándonos, calcularemos el valor promedio del momento usando la fórmula (cf. ecuación (T8.17))[2]

$$\overline{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t)\, dx. \tag{IV.43}$$

Efectuando la derivación se obtiene

$$\begin{aligned} \overline{p} &= \frac{\hbar}{2D(t-t_0)} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) x \psi(x,t)\, dx - \frac{\hbar}{8\pi D^2 (t-t_0)^2} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dx' dx'' \\ &\quad \times \psi_0^*(x'') x' \psi_0(x') e^{i\left(x'^2 - x''^2\right)/4D(t-t_0)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ix(x''-x')/2D(t-t_0)}\, dx; \end{aligned}$$

integrando sobre x,

$$\begin{aligned} \overline{p} &= \frac{\hbar}{2D(t-t_0)} \\ &\quad \times \left[\overline{x} - \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dx' dx'' \psi_0^*(x'') x' \psi_0(x') e^{i\left(x'^2 - x''^2\right)/4D(t-t_0)} \delta(x''-x')\right]. \end{aligned}$$

La integral sobre la función delta es inmediata; efectuándola queda

$$\overline{p} = \frac{m}{t-t_0}\overline{x} - \frac{m}{t-t_0} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_0^*(x') x' \psi_0(x');$$

identificando la integral con el valor medio inicial $\overline{x(t_0)}$ queda finalmente

$$\overline{x(t)} = \overline{x(t_0)} + \frac{\bar{p}}{m}(t-t_0), \tag{IV.44}$$

que coincide con el resultado anterior, como era de esperarse. Derivando esta expresión respecto del tiempo obtenemos

$$\frac{d\overline{x(t)}}{dt} = \frac{\bar{p}}{m} = \bar{v}. \tag{IV.45}$$

Obsérvese que los resultados anteriores poseen exactamente la forma de la correspondiente ley clásica. Éste es un caso particular de una ley muy general, llamada *teorema de Ehrenfest*, que establece que los valores *medios* cuánticos obedecen en general a la correspondiente ley clásica.[3]

[2] La ecuación (IV.42) es esto mismo, pero con las funciones de onda calculadas para el tiempo $t = 0$. Para la partícula libre ambas expresiones son equivalentes, porque $\bar{v}$ es constante, como sigue de (IV.40).

[3] El tema se estudia en la sección 9.3 del texto.

IV.2. Problemas adicionales

IV.9 Un haz de partículas libres que se mueve hacia la derecha sobre el eje x con momento p_0 puede ser descrito por la ecuación (T4.34),

$$\psi(x,t) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\, e^{-iE_0t/\hbar + ip_0x/\hbar} = e^{-iE_0t/\hbar}\varphi(x).$$

Demuestre que:

a) la transformada de Fourier del factor espacial de esta función es de la forma $\delta(\hbar k - p_0)$;

b) este factor es función propia del operador $-i\hbar\partial/\partial x$. Determine el correspondiente valor propio.

a) La transformada de Fourier del factor espacial

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_0x/\hbar} \tag{IV.46}$$

es

$$\tilde{\varphi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p_0/\hbar - k)x}dx = \frac{1}{\hbar}\delta(k - \frac{p_0}{\hbar}) = \delta(\hbar k - p_0). \tag{IV.47}$$

(El factor de escala se toma convencionalmente como $\sqrt{2\pi\hbar}$ para mantener consistencia con las unidades.) Este resultado muestra que la función de onda conjugada de Fourier posee sólo la componente que corresponde a $k = p_0/\hbar$, y que esta variable puede interpretarse precisamente como el momento, dividido entre $\hbar$.

b) La acción del operador propuesto sobre la función $\varphi(x)$ es

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x) = -\frac{i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\partial}{\partial x}e^{ip_0x/\hbar} = p_0\varphi(x). \tag{IV.48}$$

Luego $\varphi(x)$ es eigenfunción del operador $-i\hbar\partial/\partial x$ con eigenvalor p_0.

Aunque los resultados que se acaban de derivar son muy simples, el ejemplo es de importancia, pues las relaciones obtenidas revelan propiedades fundamentales de la descripción cuántica. En particular, estos resultados muestran que la transformada de Fourier de la función de onda espacial da información precisa sobre el comportamiento del sistema en el espacio de momentos. Las ecuaciones anteriores muestran asimismo que una eigenfunción de Schrödinger que corresponde a momento bien definido (p_0 sobre el eje x, en este caso) es a la vez función propia del operador $-i\hbar\partial/\partial x$. Esto es esencialmente lo mismo que dicen los resultados del problema IV.8, en particular la ecuación (IV.43).

IV.10 Estudie la evolución temporal de un paquete de partículas libres que para $t = 0$ están uniformemente distribuidas en el intervalo $(-L/2, L/2)$.

La función de onda inicial es

$$\psi_0(x) = \begin{cases} 1/\sqrt{L}, & -L/2 \leq x \leq L/2; \\ 0, & |x| > L/2. \end{cases} \tag{IV.49}$$

La función de onda para $t > 0$ está dada por la ecuación (IV.35), con esta condición inicial, y es

$$\psi\left(x,t\right) = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\pi}{iDLt}}\int_{-L/2}^{L/2} e^{i(x-x')^2/4Dt}\,dx'. \tag{IV.50}$$

Para calcular la integral es conveniente hacer el cambio de variable

$$z = \frac{x-x'}{\sqrt{2\pi Dt}}, \tag{IV.51}$$

con lo que resulta

$$\psi\left(x,t\right) = \frac{1}{\sqrt{2iL}}\int_{(x-L/2)/\sqrt{2\pi Dt}}^{(x+L/2)/\sqrt{2\pi Dt}} e^{i\pi z^2/2}dz, \tag{IV.52}$$

o, finalmente,

$$\psi\left(x,t\right) = \frac{1}{\sqrt{2iL}}\left[\Phi\left(\frac{x+L/2}{\sqrt{2\pi Dt}}\right) - \Phi\left(\frac{x-L/2}{\sqrt{2\pi Dt}}\right)\right], \tag{IV.53}$$

donde $\Phi(x)$ se expresa en términos de las integrales de Fresnel $C(x)$ y $S(x)$ mediante la fórmula

$$\Phi(x) = C(x) + iS(x) = \int_0^x e^{i\frac{\pi}{2}z^2}dz = \int_0^x \cos\frac{\pi}{2}z^2dz + i\int_0^x \operatorname{sen}\frac{\pi}{2}z^2dz. \tag{IV.54}$$

Vemos que la evolución temporal de este paquete sigue una ley muy complicada, expresada en términos de funciones que son características de los problemas de difracción en óptica. Es posible entender esto al considerar que el haz inicial rectangular definido por la ecuación (IV.49) puede tomarse como modelo de la onda que resulta al incidir un haz colimado de electrones sobre una apertura rectangular de ancho L; en la ranura el haz se difracta, dando lugar al resultado que acabamos de calcular. Como ambas integrales de Fresnel oscilan (con amplitud decreciente) alrededor del valor $1/2$, la distribución de partículas oscila con $x/\sqrt{t}$ (o mejor, con $\left(x \pm L/2\right)/\sqrt{t}$).[4]

Algunos casos límite son sencillos de estudiar. En particular, para $t \to \infty$ se puede aproximar $C(x) \simeq x, S(x) \simeq \pi x^3/6$, lo que conduce a un orden más bajo a

$$\psi\left(x,t\right) = \frac{1}{\sqrt{2iL}}\frac{L}{\sqrt{2\pi Dt}} = \sqrt{\frac{-iL}{4\pi Dt}}, \quad t \to \infty,\ x > 0, \tag{IV.55}$$

[4]La distribución de momentos en el haz inicial se puede obtener de la transformada de Fourier de la amplitud (IV.49) y tomando $p = \hbar k$, con k la variable de Fourier, de manera similar a como ocurrió en el problema anterior. Los fenómenos de difracción serán importantes para todas las componentes cuya longitud de de Broglie $\lambda = h/p$ sea comparable con L. Detalles sobre las integrales de Fresnel pueden verse en Abramowitz y Stegun (1965).

mostrando una tendencia de las partículas a difundirse con el tiempo, tendiendo hacia una distribución uniforme. Para $t > 0$ y grandes distancias, $x \to \infty$, se puede usar el desarrollo asintótico

$$C(z) + iS(z) \sim \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}} \left[1 - \frac{\sqrt{2}e^{i\pi/4}}{\pi z} e^{i\pi z^2/2} + \cdots \right], \quad |\arg z| < 3\pi/4, \qquad \text{(IV.56)}$$

que conduce a

$$\psi\left(x,t\right) = \sqrt{\frac{iDt}{\pi L}} \left[\frac{e^{i(x-L/2)^2/4Dt}}{x - L/2} - \frac{e^{i(x+L/2)^2/4Dt}}{x + L/2} \right], \quad x \to \infty. \qquad \text{(IV.57)}$$

* **IV.11** En la expresión general para el paquete de partículas libres (T4.7):

$$\psi(x,t) = \int A(k) e^{-i\hbar k^2 t/2m + ikx} dk \qquad \text{(IV.58)}$$

se toma $A(k) = e^{i\lambda^3 k^3/3}$. Mostrar que el paquete resultante tiene la propiedad de propagarse sin distorsión. ¿Qué tan realista es esta descripción?

El paquete propuesto es

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda^3 k^3/3 - i\hbar k^2 t/2m + ikx} dk. \qquad \text{(IV.59)}$$

El exponente se reescribe en la forma ($D = \hbar/2m$)

$$\begin{aligned} \lambda^3 k^3/3 - \hbar k^2 t/2m + kx &= \frac{1}{3}\left(\lambda k - \frac{Dt}{\lambda^2}\right)^3 - \frac{D^2 k t^2}{\lambda^3} + \frac{1}{3}\left(\frac{Dt}{\lambda^2}\right)^3 + kx \\ &= \frac{1}{3}\lambda^3 q^3 - \frac{2}{3}\left(\frac{Dt}{\lambda^2}\right)^3 + q\left(x - \frac{D^2 t^2}{\lambda^3}\right) + \frac{Dt}{\lambda^3} x, \end{aligned}$$

en donde se introdujo la nueva variable $q = k - Dt/\lambda^3$. Esto permite escribir el paquete como

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= e^{i(D/\lambda^3)\left(x - 2D^2 t^2/3\lambda^3\right)t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda^3 q^3/3 + iq\left(x - D^2 t^2/\lambda^3\right)} dq \\ &= e^{i(D/\lambda^3)\left(x - 2D^2 t^2/3\lambda^3\right)t} \psi(x - D^2 t^2/\lambda^3, 0). \end{aligned} \qquad \text{(IV.60)}$$

De esta factorización sigue que, en particular,

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \left|\psi(x - D^2 t^2/\lambda^3, 0)\right|^2, \qquad \text{(IV.61)}$$

que muestra que el paquete se propaga sin cambiar de forma como función de la variable $x - D^2 t^2/\lambda^3$; en otras palabras, la distribución mantiene su valor numérico sobre puntos que se desplazan con velocidad $2D^2 t/\lambda^3$, con aceleración constante $2D^2/\lambda^3$.

No deja de ser interesante encontrar un paquete que se propaga sin distorsión, lo que significa, entre otras cosas, que la dispersión de x se mantiene constante, mientras que es de esperarse que un paquete que evoluciona libremente se ensanche conforme se propaga (las partículas más rápidas se adelantan, mientras que

las más lentas se van rezagando). Más aún, ésta es la regla general, y sólo circunstancialmente pueden construirse situaciones realistas descritas por paquetes que mantienen su forma durante la evolución.[5] El presente caso viola esta regla a expensas de describir el estado mediante un paquete no integrable, como sigue del hecho de que para $t = 0$ se tiene $\psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda^3 k^3/3 + ikx} dk$, que es una representación integral de la función de Airy, la cual no es integrable sobre toda la recta. Paquetes normalizables conducen en general a dispersión creciente con el tiempo.

IV.12 Demuestre que la velocidad de fase asociada a la onda de de Broglie de una partícula con masa en reposo mayor que cero es siempre mayor que c y depende de la longitud de onda.

Como se discute en la sección 2.2 del texto, si la energía de la partícula se escribe en la forma $E = h\nu$, la velocidad de fase de la onda asociada, definida como

$$v_f = \lambda\nu \tag{IV.62}$$

puede escribirse, al identificar esta onda con la de de Broglie con longitud de onda $\lambda = h/p$, como

$$v_f = \lambda \frac{E}{h} = \frac{E}{p}. \tag{IV.63}$$

Insertando en esta expresión la fórmula relativista $E = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}$ se obtiene

$$v_f = c\sqrt{1 + \frac{m_0^2 c^2}{p^2}} = c\sqrt{1 + \frac{\lambda^2 m_0^2 c^2}{h^2}} = c\sqrt{1 + \left(\frac{\lambda}{\lambda_C}\right)^2}, \tag{IV.64}$$

en donde λ_C es la longitud de onda de Compton de la partícula.

Este resultado muestra que para cualquier partícula masiva se cumple que $v_f > c$. La velocidad de fase es un concepto geométrico, que no implica transmisión alguna de efectos físicos, por lo que puede tomar cualquier valor sin crear contradicción alguna, por ejemplo, con la teoría de la relatividad. Lo que está relacionado con la velocidad de la partícula, es decir, con el desplazamiento de efectos físicos, es la velocidad de grupo (este punto se discute con más detalle en el siguiente problema).

Como ejemplo de una velocidad geométrica que puede alcanzar magnitudes arbitrariamente altas, considérese el punto de intersección de la cuchilla de una guillotina para papel con la superficie en que descansa el papel. Si el ángulo entre esta superficie y el filo de la cuchilla es α, y la velocidad con que desciende ésta es v, la velocidad con que se mueve el punto de intersección es $\dot{x} = v \cot\alpha$, que para $\alpha \to 0$ se hace infinita. Es claro que no hay parte alguna del sistema que se mueva a esta velocidad, que es meramente aparente.

IV.13 Este problema consta de dos partes:

a) Considere ondas que se propagan en agua. Para aguas poco profundas se producen ondas superficiales, para las que la relación entre frecuencia y longitud

[5] En la sección 11.1 del texto se estudia el ejemplo del oscilador armónico, cuyos estados coherentes o de mínima dispersión poseen esta propiedad. (En la sección 11.6 se amplía el estudio de los estados coherentes.)

de onda (conocida en general como *relación de dispersión*) es

$$\nu = \left(\frac{2\pi T}{\rho\lambda^3}\right)^{1/2},$$

donde T es la tensión superficial y ρ la densidad del medio. A su vez, para ondas en aguas profundas la relación de dispersión es

$$\nu = \left(\frac{g}{2\pi\lambda}\right)^{1/2}.$$

Determine en ambos casos la velocidad de grupo de las ondas y su relación con la velocidad de fase.

b) La velocidad de fase de una onda electromagnética monocromática que se propaga en una guía de ondas ideal tiene la forma

$$v_f = \frac{c}{\sqrt{1-(\omega_0/\omega)^2}},$$

con c la velocidad de la luz en el vacío y ω_0 una frecuencia característica (real) de la guía de ondas. Determine la velocidad de grupo de estas ondas. Note que la velocidad de fase es mayor que c; ¿por qué no viola esto la relatividad especial?

a) Definiendo como es usual $k = 2\pi/\lambda$, $\omega = 2\pi\nu$, la relación de dispersión para ondas superficiales en aguas poco profundas puede escribirse como

$$\omega = 2\pi\left[\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{T}{\rho}\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^3\right]^{1/2},$$

es decir

$$\omega = \sqrt{\frac{T}{\rho}}k^{3/2}. \tag{IV.65}$$

De la definición de velocidad de grupo,

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k}, \tag{IV.66}$$

sigue de inmediato que

$$v_g = \frac{3}{2}\sqrt{\frac{Tk}{\rho}} = \frac{3}{2}\sqrt{\frac{2\pi T}{\rho\lambda}}. \tag{IV.67}$$

Por otro lado, la velocidad de fase es

$$v_f = \lambda\nu = \sqrt{\frac{2\pi T}{\lambda\rho}}. \tag{IV.68}$$

Comparando resultados, queda

$$v_f = \frac{2}{3}v_g. \tag{IV.69}$$

Procediendo de forma análoga, la relación de dispersión para aguas profundas resulta

$$\omega = \sqrt{gk}, \tag{IV.70}$$

de la que sigue que

$$v_g = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{g}{k}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\lambda g}{2\pi}} \tag{IV.71}$$

y que

$$v_f = \lambda\nu = \sqrt{\frac{\lambda g}{2\pi}} = 2v_g. \tag{IV.72}$$

b) Para el caso de la guía de ondas electromagnéticas, cuando se cumple que

$$v_f = \lambda\nu = \frac{\omega}{k} = \frac{c}{\sqrt{1-(\omega_0/\omega)^2}} \tag{IV.73}$$

se llega a la relación de dispersión

$$k = \frac{\omega}{c}\sqrt{1-\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2}, \tag{IV.74}$$

o bien

$$\omega = \sqrt{c^2k^2+\omega_0^2}. \tag{IV.75}$$

La velocidad de grupo de esta onda resulta

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{c^2k}{\sqrt{c^2k^2+\omega_0^2}} = c\sqrt{1-\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2}. \tag{IV.76}$$

Es claro que $v_g \leq c$, como debe ser para una velocidad que describe la propagación de la energía electromagnética.

De la teoría de la relatividad especial se sabe que bajo ninguna circunstancia una señal física se puede propagar con velocidad mayor que c, la velocidad de la luz en el vacío. La ecuación (IV.73) muestra que $v_f > c$. Igual que en el problema anterior, esta aparente contradicción se debe al hecho de que una onda monocromática no transporta energía (ni siquiera información), puesto que se extiende de manera uniforme indefinidamente en el espacio y el tiempo. Por el contrario, una señal en forma de una onda modulada se propaga con velocidad de grupo, la que siempre es menor que c en medios normalmente dispersores.[6]

IV.3. Ejercicios

IV.14 Considere una función de onda de partículas libres que para $t = 0$ tiene la forma $\varphi(x)e^{ip_0x/\hbar}$, donde $\varphi(x)$ es real y difiere de 0 sólo para valores de x en el intervalo $(-\delta, \delta)$. Encuentre el intervalo de x en que la función de onda es significativamente diferente de cero para el tiempo t.

[6]En regiones de dispersión anómala, v_g puede ser mayor que c. Sin embargo, en estos casos la velocidad de propagación de los fenómenos físicos es la llamada *velocidad de señal*, que es diferente de la de grupo y menor que la de la luz. Véase por ejemplo Hecht (1977).

IV.15 Encuentre la función de onda para el tiempo t para partículas libres cuya amplitud para $t = 0$ es

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{3/4}} e^{-\mathbf{r}^2/2\sigma^2 + i\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{r}/\hbar}.$$

IV.16 La ecuación de Schrödinger para partícula libre tiene la solución general (ecuación (T4.4))

$$\psi(x,t) = Ae^{-iEt/\hbar + ipx/\hbar} + Be^{-iEt/\hbar - ipx/\hbar}.$$

Demuestre que las condiciones iniciales pueden escogerse tales que:

a) $\psi(x,t)$ sea eigenfunción del operador $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ (cf. ecuación (IV.43));

b) la densidad de probabilidad resulte independiente del tiempo, o sea que represente una onda estacionaria.

IV.17 Resuelva el problema de la partícula libre en coordenadas cilíndricas polares.

IV.18 Considere un paquete de partículas libres con una distribución gaussiana de momentos:

$$A(k) = e^{-(k-k_0)^2/q^2}.$$

a) Encuentre $\psi(x,t)$ para este paquete.

b) ¿Con qué velocidad se desplaza el centro de masa del paquete?

c) ¿Con qué velocidad crece la dispersión espacial del paquete? ¿Puede llegar a ser esta velocidad mayor que la de la luz? Explique su respuesta.

IV.19 Demuestre que la velocidad de fase de la onda de de Broglie asociada a una partícula libre que se mueve con velocidad v está dada por

$$v_f = \frac{c^2}{v}.$$

Sugerencia: Utilice la relación relativista $E = mc^2$.

IV.20 Demuestre que se puede escribir

$$\delta(x-\xi) = \frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi\xi}{L}\right)\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad 0 < \xi < L.$$

IV.21 Una representación importante de la delta de Dirac se construye considerando el límite $n \to \infty$ de la secuencia

$$\delta_n(x) = \begin{cases} c_n\left(1-x^2\right)^n, & \text{para} \quad 0 \le |x| \le 1, \quad n = 1,2,3,\ldots \\ 0, & \text{para} \quad |x| > 1, \end{cases}$$

pues es punto central en la demostración del teorema de Weierstrass. Determine los coeficientes c_n tales que

$$\int_{-1}^{1} \delta_n(x)\ dx = 1$$

y demuestre que

$$\lim_{n\to\infty} \int_{-1}^{1} f(x)\,\delta_n(x)\ dx = f(0).$$

V. Ecuación completa de Schrödinger

V.1. Problemas del texto

V.1 Demuestre que si ψ_1 y ψ_2 son soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, se cumple la siguiente relación que generaliza la ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_1^*\psi_2 + \frac{i\hbar}{2m}\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^* - \psi_1^*\nabla\psi_2) = 0.$$

Escribimos la ecuación de Schrödinger para ψ_2 y ψ_1^*, con el mismo potencial:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2 + V\psi_2, \tag{V.1}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1^* + V\psi_1^*. \tag{V.2}$$

Multiplicamos la primera de estas ecuaciones por ψ_1^* y la segunda por ψ_2, y restamos los resultados para obtener

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1^*\psi_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi_1^*\nabla^2\psi_2 - \psi_2\nabla^2\psi_1^*\right).$$

Observamos ahora que puede escribirse

$$\psi_1^*\nabla^2\psi_2 = \nabla\cdot(\psi_1^*\nabla\psi_2) - (\nabla\psi_1^*)\cdot(\nabla\psi_2)$$

y una relación análoga para $\psi_2\nabla^2\psi_1^*$, por lo que

$$\psi_1^*\nabla^2\psi_2 - \psi_2\nabla^2\psi_1^* = \nabla\cdot(\psi_1^*\nabla\psi_2 - \psi_2\nabla\psi_1^*). \tag{V.3}$$

Sustituyendo en la ecuación anterior, se obtiene finalmente

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_1^*\psi_2 + \frac{i\hbar}{2m}\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^* - \psi_1^*\nabla\psi_2) = 0. \tag{V.4}$$

Obsérvese que al escribir la ecuación conjugada (V.2) se supuso que el potencial $V(\mathbf{r})$ es real; un potencial complejo produciría un término adicional en la ecuación (V.4).

V.2 Estudie detalladamente la continuidad de ψ' en los siguientes problemas unidimensionales:

a) pozo rectangular con $|V| \to \infty$;

b) $V(x) = a\delta(x - x_0)$.

El inciso a) de este problema se discute detalladamente en la mayoría de los libros de mecánica cuántica, mientras que el inciso b) será analizado con detalle en el problema VI.3. Aquí nos limitaremos a lo esencial para responder a la pregunta del problema.

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger para el pozo infinito de anchura a,

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi, \qquad 0 < x < a, \tag{V.5}$$

son continuas en todo punto:

$$\begin{array}{ll} \psi_n(x) \sim \text{sen}(\pi n x/a), & 0 < x < a, \\ \psi_n(x) = 0, & x \leq 0,\ x \geq a, \end{array} \tag{V.6}$$

en tanto que sus derivadas

$$\begin{array}{ll} \psi_n'(x) \sim \cos(\pi n x/a), & 0 < x < a, \\ \psi_n'(x) = 0, & x \leq 0,\ x \geq a, \end{array} \tag{V.7}$$

son discontinuas en $x = 0, a$. Éstos son precisamente los puntos de retorno, donde, en el caso clásico, la velocidad de la partícula cambia bruscamente de signo por efecto de la pared perfectamente reflectora. La discontinuidad de $\psi_n'(x)$ en $x = 0$ y $x = a$ es debida a la discontinuidad *infinita* del potencial en esos puntos, como puede demostrarse con un análisis similar al del siguiente caso.

En el caso del inciso b), para $x \neq x_0$ la ecuación de Schrödinger es la de partícula libre, pero en la vecindad de $x = x_0$ se levanta una barrera infinitamente alta y angosta. Integrando la ecuación de Schrödinger en la vecindad $(x_0-\epsilon, x_0+\epsilon)$ se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon}\frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi}{dx}\right) + a\psi(x_0) = 2\epsilon E\psi(x_0). \tag{V.8}$$

Como ψ es continua en x_0, el lado derecho se anula cuando $\epsilon \to 0$, de manera que

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x_0+\epsilon} - \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x_0-\epsilon} = \frac{2ma}{\hbar^2}\psi(x_0), \tag{V.9}$$

o sea que la derivada de la función de onda es discontinua en x_0, siendo el valor de la discontinuidad proporcional a la magnitud a del potencial delta. Una vez más, la discontinuidad de ψ' se da en el punto clásico de retorno, en el que la velocidad de la partícula sufre un cambio brusco por la reflexión.

V.3 Muestre que el propagador $K(x, t \mid x', t')$, definido con la ecuación (T5.22), es una solución de la ecuación de Schrödinger y que el propagador $K_c(x, t \mid x', t')$ dado por la ecuación (T5.23) es una función de Green de la misma ecuación. ¿Qué propiedades posee K_c que lo distinguen de otras posibles funciones de Green de la ecuación de Schrödinger?

a) La expresión (T5.22) para el propagador es

$$K(x, t \mid x', t') = \sum_n e^{-i\omega_n(t-t')}\varphi_n^*(x')\,\varphi_n(x), \tag{V.10}$$

donde se ha introducido la abreviación $\omega_n = E_n/\hbar$ y φ_n es una solución de la ecuación estacionaria de Schrödinger,

$$E_n\varphi_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi_n + V(x)\varphi_n. \tag{V.11}$$

De (V.10) sigue que

$$\nabla^2\, K\left(x,t \mid x',t'\right) = \sum_n e^{-i\omega_n(t-t')}\varphi_n^*\left(x'\right)\nabla^2\varphi_n\left(x\right),$$

$$V\left(x\right)K\left(x,t \mid x',t'\right) = \sum_n e^{-i\omega_n(t-t')}\varphi_n^*\left(x'\right)V\left(x\right)\varphi_n\left(x\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial t}K\left(x,t \mid x',t'\right) = -\sum_n i\omega_n e^{-i\omega_n(t-t')}\varphi_n^*\left(x'\right)\varphi_n\left(x\right).$$

Podemos entonces escribir con ayuda de la ecuación (V.11):

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\, K\left(x,t \mid x',t'\right) + V(x)K\left(x,t \mid x',t'\right) & \\
&= \sum_n e^{-i\omega_n(t-t')}\varphi_n^*\left(x'\right)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi_n(x) + V(x)\varphi_n(x)\right] \\
&= \sum_n E_n e^{-i\omega_n(t-t')}\varphi_n^*\left(x'\right)\varphi_n(x) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K\left(x,t \mid x',t'\right), \qquad \text{(V.12)}
\end{aligned}$$

lo que demuestra que $K\left(x,t \mid x',t'\right)$ es solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para el mismo potencial al que corresponden las funciones propias $\varphi_n(x)$.

De hecho, podríamos habernos ahorrado la demostración, notando que si en (V.10) se considera a x' y t' como parámetros y se define $C_n(x',t') \equiv e^{i\omega_n t'}\varphi_n^*\left(x'\right)$, se obtiene $K\left(x,t \mid x',t'\right) = \sum_n C_n(x',t')e^{-i\omega_n t}\varphi_n\left(x\right)$, que es la forma general de desarrollar la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (cf. ecuación (T5.7)). Lo novedoso del presente cálculo está en la posibilidad de intercambiar los papeles de los juegos de variables $(x,t) \leftrightarrow (x',t')$, efectuando simultáneamente una conjugación de la correspondiente función de onda.

b) El propagador $K_c\left(x,t \mid x',t'\right)$ está dado por la ecuación (T5.23), es decir,

$$K_c\left(x,t \mid x_0,t_0\right) = \begin{cases} \sum_n e^{-i\omega_n(t-t_0)}\varphi_n^*\left(x_0\right)\varphi_n\left(x\right), & t > t_0, \\ 0, & t < t_0. \end{cases} \tag{V.13}$$

Para $t > 0$, (V.13) coincide con (V.10) y satisface por lo tanto la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Para $t < 0$ se satisface la misma ecuación, ahora trivialmente, pues todo es nulo. En $t = t_0$ hay una discontinuidad, cuyo valor está dado por

$$\sum_n \varphi_n^*\left(x_0\right)\varphi_n\left(x\right) = \delta\left(x - x_0\right), \quad t \to t_0, \tag{V.14}$$

resultado que expresa la *relación de completez*[1] de las funciones φ_n, y vale para toda base completa de funciones ortonormales (cf. ecuación (T4.13)). Esto

[1] Se le conoce también, particularmente en España, como relación de completitud.

significa que la derivada del propagador K_c respecto de t da una función delta en el tiempo, multiplicada por la altura de la discontinuidad, $\delta(x - x_0)$. Por consiguiente, si se repite el cálculo anterior se obtendrá la ecuación de Schrödinger con un término adicional:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K_c\left(x,t \mid x',t'\right) + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 K_c\left(x,t \mid x',t'\right) - V(x) K_c\left(x,t \mid x',t'\right) = i\hbar\delta(x - x_0)\,\delta(t - t_0)\,. \tag{V.15}$$

El nuevo término juega el papel de fuente del propagador, pues agrega una inhomogeneidad a la ecuación diferencial. La ecuación (V.15) muestra que $K_c(x,t \mid x_0,t_0)$ es una función de Green de la ecuación de Schrödinger, es decir, una solución fundamental de esta ecuación con una fuente puntual. Como la propagación se realiza sólo hacia el futuro (pues $K_c = 0$ para $t < t_0$), se le llama *propagador causal*.[2]

V.4 Demuestre que el propagador dado por la ecuación (V.10) (o la (T5.22)) posee la siguiente propiedad integral:

$$K(x_1,t_1 \mid x_2,t_2) = \int K(x_1,t_1 \mid x,t)\,K(x,t \mid x_2,t_2)\,dx, \qquad t_1 < t < t_2.$$

De la ecuación (V.10) sigue que

$$K(x,t \mid x_2,t_2) = \sum_n e^{-i\omega_n(t-t_2)}\varphi_n^*(x_2)\,\varphi_n(x)\,,$$

$$K(x_1,t_1 \mid x,t) = \sum_{n'} e^{-i\omega_{n'}(t_1-t)}\varphi_{n'}^*(x)\,\varphi_{n'}(x_1)\,.$$

Multiplicando ambas expresiones entre sí e integrando sobre x, se obtiene

$$\int K(x_1,t_1 \mid x,t)\,K(x,t \mid x_2,t_2)\,dx = \sum_{nn'} e^{-i(\omega_n-\omega_{n'})t}e^{i(\omega_n t_2-\omega_{n'}t_1)}\varphi_n^*(x_2)\,\varphi_{n'}(x_1)\int\varphi_{n'}^*(x)\varphi_n(x)dx. \tag{V.16}$$

Tomando en cuenta que las eigenfunciones $\varphi_n(x)$ son ortonormales,

$$\int\varphi_{n'}^*(x)\,\varphi_n(x)\,dx = \delta_{nn'}, \tag{V.17}$$

y efectuando la suma sobre n', sigue que

$$\int K(x_1,t_1 \mid x,t)\,K(x,t \mid x_2,t_2)\,dx = \sum_n e^{-i\omega_n(t_1-t_2)}\varphi_n^*(x_2)\,\varphi_n(x_1) = K(x_1,t_1 \mid x_2,t_2)\,, \tag{V.18}$$

que es el resultado solicitado. Obsérvese que en la expresión integral, x toma todos los valores posibles, en tanto que t debe ser un tiempo fijo, intermedio entre t_1 y

[2] Una discusión introductoria sobre estos temas especialmente clara y rica puede verse en Feynman y Hibbs (1965).

t_2. Es fácil mostrar que esta propiedad integral del propagador se extiende a un número arbitrario de integraciones, cronológicamente ordenadas.

Desde el punto de vista físico, el resultado anterior es natural para la descripción de un sistema lineal. A partir de la expresión general (cf. ecuación (T4.40))

$$\psi(x,t) = \int K\left(x,t \mid x_1,t_1\right)\psi(x_1,t_1)dx, \quad t > t_1, \tag{V.19}$$

sigue, por iteración, con $t > t_1 > t_0$,

$$\psi(x,t) = \int\int K\left(x,t \mid x_1,t_1\right)K\left(x_1,t_1 \mid x_0,t_0\right)\psi(x_0,t_0)dx_1dx_0. \tag{V.20}$$

A su vez, (V.19) puede reescribirse como

$$\psi(x,t) = \int K\left(x,t \mid x_0,t_0\right)\psi(x_0,t_0)dx_0, \quad t > t_0, \tag{V.21}$$

de donde la ecuación (V.18) sigue de inmediato (con un cambio apropiado del nombre de las variables). Esta derivación es posible porque los efectos de la fuente en x_0 son propagados por $K\left(x_1,t_1 \mid x_0,t_0\right)$ y se convierten en una nueva fuente $\psi(x_1,t_1)$, que es a su vez propagada por $K\left(x,t \mid x_1,t_1\right)$. Para este último propagador, el que $\psi(x_1,t_1)$ sea directamente una fuente, o el efecto de la propagación lineal de una fuente anterior, es indistingible.

V.5 Estudie detalladamente el movimiento del paquete descrito por la amplitud (T.5.28).

La amplitud referida es

$$\psi(x,t) = \frac{2}{a}\sum_n e^{-i\omega_n t}\,\mathrm{sen}\left(\frac{\pi n}{a}x\right)\mathrm{sen}\left(\frac{\pi n}{a}x_0\right), \tag{V.22}$$

en donde $\omega_n = E_n/\hbar = (\pi^2\hbar/2m_0)n^2$, y describe el comportamiento de electrones ligados a un pozo rectangular infinito, localizados inicialmente en el punto x_0. La aplicación directa de la expresión (T5.15) (o (V.26)) para la densidad de corriente de flujo da

$$j(x,t) = \frac{2\pi\hbar}{m_0a^2}\sum_{m,n} m\,\mathrm{sen}^2\left(\frac{\pi n}{a}x_0\right)\mathrm{sen}\left(\frac{\pi n}{a}x\right)\cos\left(\frac{\pi m}{a}x\right)\mathrm{sen}\left(\omega_n-\omega_m\right)t. \tag{V.23}$$

Esta expresión representa un desarrollo de Fourier en el tiempo de la densidad de corriente, con coeficientes que dependen de la posición; las frecuencias de estas oscilaciones están dadas por la expresión $\omega_{nm} \equiv \omega_n - \omega_m = \left(E_n - E_m\right)/\hbar$, y corresponden precisamente a las frecuencias de transición de Bohr. De (V.19) vemos que, en particular, para $t = 0$ la corriente es nula, por lo que las partículas fueron simplemente "soltadas"; todo el movimiento ulterior es de origen cuántico.

V.6 A partir de $\psi = Re^{iS}$, con R y S funciones reales de la posición y el tiempo, deduzca las ecuaciones (T5.26) y (T5.27):

$$\psi(x) = \sqrt{\rho}e^{iS}, \quad S\left(x\right) = \frac{m}{\hbar}\int_0^x v\left(x'\right)dx'.$$

Al escribir la función de onda en la forma

$$\psi = R\, e^{iS}, \tag{V.24}$$

con R y S funciones reales, se obtiene de inmediato que $\rho = \psi\psi^* = R^2$, es decir, $R = \sqrt{\rho}$. Por lo tanto

$$\psi = \sqrt{\rho} e^{iS}. \tag{V.25}$$

La ecuación de continuidad, consecuencia directa de la ecuación de Schrödinger,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}\right) = 0,$$

da para la densidad de corriente de probabilidad (o densidad de flujo)

$$j = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}\right). \tag{V.26}$$

Escribiendo $j = \rho v = \psi^*\psi v$, donde por definición v es la velocidad (local) de flujo, queda

$$v = \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{1}{\psi^*}\frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \frac{1}{\psi}\frac{\partial \psi}{\partial x}\right). \tag{V.27}$$

Usando la ecuación (V.25) sigue de aquí

$$v = \frac{\hbar}{m}\frac{\partial S}{\partial x}, \tag{V.28}$$

cuya inversión da

$$S(x) = \frac{m}{\hbar}\int_0^x v\left(x'\right) dx'. \tag{V.29}$$

Este resultado muestra que la fase de la función de onda juega el papel de un potencial de velocidad de flujo.

V.7 Un sistema físico se encuentra inicialmente (para $t = 0$) en un estado que es superposición de las eigenfuciones φ_1 y φ_2 del hamiltoniano, con energías propias E_1 y E_2, respectivamente. El estado φ_1 es tres veces más probable que el estado φ_2. Escriba la función de onda inicial $\psi_0(x)$ más general posible consistente con los datos anteriores y determine $\psi(x,t)$ para todo$t > 0$. ¿Se encuentra el sistema en un estado estacionario? ¿Posee este estado algunas propiedades físicas que no varían con el tiempo?

Denotemos a la función de onda inicial con $\psi(x,t_0) = \psi_0(x)$. En $t_0 = 0$ la función de onda es una superposición de las eigenfunciones φ_1 y φ_2 y tiene la forma

$$\psi_0(x) = a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2, \tag{V.30}$$

donde a_1 y a_2 son números complejos en general y representan la amplitud (de probabilidad) de φ_1 y φ_2 contenida en el estado $\psi_0(x)$. Puesto que el estado φ_1 es tres veces más probable que el estado φ_2, estos coeficientes deben satisfacer

$$|a_1|^2 = 3\,|a_2|^2,$$

o bien, tomando por simplicidad $a_2 \equiv a$ como real,

$$a_1 = \sqrt{3} a_2 e^{i\alpha},$$

donde α representa una fase (constante) arbitraria. Así pues, debemos escribir

$$\psi_0(x) = a\left(\sqrt{3}e^{i\alpha}\varphi_1 + \varphi_2\right). \tag{V.31}$$

Para encontrar el valor de a basta con normalizar la función,

$$\int \psi_0^*(x)\,\psi_0(x)\,dx = |a|^2 \int (3\varphi_1^*\varphi_1 + \varphi_2^*\varphi_2)\,dx = 4\,|a|^2 = 1.$$

De aquí que se pueda tomar

$$a = \tfrac{1}{2}.$$

La función de onda inicial, normalizada, más general posible es

$$\psi_0(x) = \tfrac{1}{2}\left(\sqrt{3}e^{i\alpha}\varphi_1 + \varphi_2\right). \tag{V.32}$$

Nótese que una función de onda enteramente equivalente es

$$\psi_0(x) = \tfrac{1}{2}\left(\sqrt{3}\varphi_1 + e^{-i\alpha}\varphi_2\right), \tag{V.33}$$

pues (V.32) y (V.33) difieren sólo por un factor de fase global $e^{-i\alpha}$, que es físicamente irrelevante. La fase *relativa* entre φ_1 y φ_2 sí es físicamente significativa, y es la misma en ambas expresiones.

La ecuación (T5.7),

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar}\varphi_n(x), \tag{V.34}$$

permite calcular la función de onda para el tiempo t debida a una función de onda inicial arbitraria; los coeficientes c_n se determinan con

$$c_n = \int \varphi_n^*(x)\,\psi(x,t)\,e^{iE_n t/\hbar}dx. \tag{V.35}$$

Como las c_n son independientes del tiempo, si se toma $t = 0$ queda todo expresado en términos de la función de onda inicial, lo que simplifica las expresiones anteriores:

$$c_n = \int \varphi_n^*(x)\,\psi_0(x)\,dx. \tag{V.36}$$

En el presente caso se tiene simplemente

$$c_n = \int \varphi_n^*(x)\,\psi_0(x)\,dx = \tfrac{1}{2}\left(\sqrt{3}e^{i\alpha}\delta_{n,1} + \delta_{n,2}\right),$$

en donde hemos utilizado la propiedad de ortonormalidad de las eigenfunciones φ_n. Sustituyendo en (V.34) se obtiene

$$\psi(x,t) = \tfrac{1}{2}\left(\sqrt{3}e^{i\alpha}e^{-iE_1 t/\hbar}\varphi_1 + e^{-iE_2 t/\hbar}\varphi_2\right). \tag{V.37}$$

Dado que hay dos coeficientes distintos de cero, si $E_1 \neq E_2$, es decir, si los estados no son degenerados, el sistema no se encuentra en un estado estacionario, sino en uno que evoluciona con el tiempo. Por ejemplo, la densidad de partículas está dada por

$$\rho = \tfrac{3}{4}\varphi_1^*\varphi_1 + \tfrac{1}{4}\varphi_2^*\varphi_2 + \tfrac{\sqrt{3}}{4}\left[\varphi_1^*\varphi_2 e^{-i\alpha}e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar} + \varphi_2^*\varphi_1 e^{i\alpha}e^{i(E_2-E_1)t/\hbar}\right]. \tag{V.38}$$

Vemos que, en efecto, la parte estacionaria de esta densidad, $\frac{1}{4}(3\rho_1+\rho_2)$, se ve modificada por los términos de interferencia que oscilan periódicamente con la frecuencia de transición $\omega_{21}=(E_2-E_1)/\hbar$ (suponiendo que $E_2>E_1$). La propia función de onda (V.37) puede escribirse en una forma similar, que pone en evidencia que no se trata de un estado estacionario si $E_2-E_1\neq 0$:

$$\psi(x,t)=\tfrac{1}{2}e^{-iE_2t/\hbar}\left(\sqrt{3}e^{i\omega_{21}t+i\alpha}\varphi_1+\varphi_2\right). \tag{V.39}$$

Pese a la dependencia temporal, existen algunas propiedades estadísticas independientes del tiempo; por ejemplo la energía media es

$$\overline{E}=\tfrac{3}{4}E_1+\tfrac{1}{4}E_2$$

para todo t.

V.8 Calcule la constante de normalización de la función de onda dada por la ecuación (3) del problema ilustrativo 5.2 del texto, donde se estudia la evolución de un paquete bajo la acción de un campo constante descrito por el potencial qx, con amplitud inicial $\psi_0(x)$. Suponga que ψ_0 está normalizada a la unidad.

La función de onda en cuestión es

$$\psi(x,t)=\frac{A}{\sqrt{t}}\int dx'\psi_0(x')\exp\left[\frac{im}{2\hbar t}\left(x-x'-\frac{qt^2}{2m}\right)^2-\frac{iq^2t^3}{6m\hbar}-\frac{iqx't}{\hbar}\right], \tag{V.40}$$

por lo que la condición de normalización es

$$\frac{A^2}{t}\int\int\int dxdx'dx''\psi_0^*(x'')\,\psi_0(x') \times\exp\left\{\frac{im}{2\hbar t}\left[\left(x-x'-\frac{qt^2}{2m}\right)^2-\left(x-x''-\frac{qt^2}{2m}\right)^2\right]-\frac{iqt(x'-x'')}{\hbar}\right\}=1. \tag{V.41}$$

Desarrollando el argumento de la exponencial podemos escribir

$$\begin{aligned}1 &= \frac{A^2}{t}\int\int dx'dx''\psi_0^*(x'')\,\psi_0(x')\\ &\times\exp\left\{\frac{im}{2\hbar t}\left[\left(x'+\frac{qt^2}{2m}\right)^2-\left(x''+\frac{qt^2}{2m}\right)^2\right]\right\}\\ &\times\exp\left[-iqt(x'-x'')/\hbar\right]\int dx\exp\left[\frac{im}{2\hbar t}2x(x''-x')\right].\end{aligned}$$

Como

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left[\frac{im}{\hbar t}x(x''-x')\right]=\frac{2\pi\hbar t}{m}\delta(x''-x'), \tag{V.42}$$

la integral se reduce a

$$1=\frac{A^2}{t}\frac{2\pi\hbar t}{m}\int dx'\psi_0^*(x')\,\psi_0(x')=A^2\frac{2\pi\hbar}{m}.$$

De aquí sigue de inmediato, tomando A como real y positiva,

$$A=\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^{1/2}. \tag{V.43}$$

V.9 Determine la función de onda ψ del problema anterior para el caso en que las partículas siguen inicialmente una distribución espacial uniforme y se mueven con velocidad de flujo v_0. Calcule la densidad de corriente y el movimiento descrito por esta solución.

Usamos las ecuaciones (V.25) y (V.29) para escribir la función de onda inicial en la forma

$$\psi_0(x) = \sqrt{\rho_0} e^{iS_0}, \quad S_0(x) = \frac{m}{\hbar}\int_0^x v_0\left(x'\right)\, dx'.$$

Como v_0 no depende de x, tenemos que

$$S_0(x) = \frac{m}{\hbar} v_0\, x \tag{V.44}$$

y podemos escribir

$$\psi_0(x) = \sqrt{\rho_0} e^{imv_0\, x/\hbar}. \tag{V.45}$$

Al sustituir este resultado en la expresión V.40 del problema anterior queda

$$\psi(x,t) = A\sqrt{\frac{\rho_0}{t}}\int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left[\frac{im}{2\hbar t}\left(x - x' - \frac{qt^2}{2m}\right)^2 - \frac{iq^2t^3}{6m\hbar} - \frac{iqx't}{\hbar} + i\frac{m}{\hbar}v_0 x'\right]. \tag{V.46}$$

Factorizamos el argumento de la exponencial para realizar la integración, tomando en cuenta que

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi}. \tag{V.47}$$

Resulta, insertando además el valor de A dado en (V.43):

$$\psi(x,t) = \sqrt{i\rho_0}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q^2t^3}{6m} + qtx + \tfrac{1}{2}mv_0^2 t - mv_0 x - \tfrac{1}{2}qt^2 v_0\right)\right]. \tag{V.48}$$

Esta solución nos permite calcular la velocidad de flujo para todo tiempo $t > 0$:

$$v = \frac{\hbar}{m}\frac{\partial S}{\partial x} = v_0 - \frac{q}{m}t, \tag{V.49}$$

resultado que muestra que la fuerza externa constante desacelera el paquete, precisamente como sucedería con partículas clásicas. La densidad de corriente asociada a esta velocidad es

$$j = \rho v = \rho_0\left(v_0 - \frac{q}{m}t\right), \tag{V.50}$$

donde ρ_0 debe estar apropiadamente normalizada.

V.10 Haga lo mismo que en el problema anterior, suponiendo ahora que la distribución espacial inicial de las partículas es gaussiana y su velocidad de flujo inicial es cero, o sea

$$\psi_0(x) = \left(2\pi a_0^2\right)^{-1/4} e^{-(x-x_0)^2/4a_0^2}.$$

Muestre que la anchura media del paquete crece con el tiempo según la ley

$$a(t) = a_0\sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 a_0^4}}.$$

Tenemos que

$$\begin{aligned}\psi\left(x,t\right) &= \frac{A}{\left(2\pi a_0^2\right)^{1/4}\sqrt{t}} \\ &\quad\times\int dx'\exp\left\{\frac{im}{2\hbar t}\left(x-x'-\frac{qt^2}{2m}\right)^2-\frac{iq^2t^3}{6m\hbar}\right. \\ &\quad\left.-\frac{iqx't}{\hbar}-\frac{\left(x'-x_0\right)^2}{4a_0^2}\right\}.\end{aligned} \tag{V.51}$$

Para efectuar la integración desarrollamos el exponente y factorizamos; la integral resultante puede realizarse fácilmente utilizando la fórmula (V.47). Se obtiene

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{A}{\left(2\pi a_0^2\right)^{1/4}\sqrt{t}}\left[\frac{4a_0^2\hbar t\left(\hbar t+2ia_0^2m\right)}{\hbar^2t^2+4a_0^4m^2}\right]^{1/2} \\ &\quad\times\exp\left\{-\frac{x_0^2}{4a_0^2}+i\left[\frac{m}{2\hbar t}\left(x-\frac{qt^2}{2m}\right)^2-\frac{q^2t^3}{6m\hbar}\right]+\frac{1}{4a_0^2\hbar t}\zeta\right\},\end{aligned} \tag{V.52}$$

donde

$$\zeta=\frac{\left(\hbar t+2ia_0^2m\right)\left(x_0\hbar t-iqa_0^2t^2-2ima_0^2x\right)^2}{\hbar^2t^2+4a_0^4m^2}. \tag{V.53}$$

La densidad de partículas que corresponde a esta amplitud es

$$\rho\left(x,t\right)=\frac{4A^2a_0\hbar}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{\hbar^2t^2+4a_0^4m^2}}\exp\left[-\frac{\left[x-\left(x_0+\frac{qt^2}{2m}\right)\right]^2}{2a_0^2\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2a_0^4}\right)}\right]. \tag{V.54}$$

Esta densidad se normaliza a la unidad con $A^2=m/2\hbar$. Así se obtiene finalmente

$$\rho\left(x,t\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}a_t}\exp\left[-\frac{\left(x-x_0-qt^2/2m\right)^2}{2a_t^2}\right], \tag{V.55}$$

que es una distribución gaussiana, cuyo centro se desplaza aceleradamente

$$\bar{x}=x_0+qt^2/2m \tag{V.56}$$

y cuya anchura crece con el tiempo,

$$a_t=a(t)=a_0\sqrt{1+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2a_0^4}}. \tag{V.57}$$

Para determinar la velocidad de flujo se requiere conocer la parte de la función S que depende de x. De (V.52) y (V.53) tenemos que

$$S(x)=\frac{m}{2\hbar t}\left(x-\frac{qt^2}{2m}\right)^2+\frac{\operatorname{Im}\zeta(x)}{4a_0^2\hbar t}+\cdots \tag{V.58}$$

De aquí sigue que

$$v(x,t)=\frac{\hbar}{m}S'$$

$$= \frac{x}{t}\left(1-\frac{a_0^2}{a_t^2}\right) - \frac{q}{2m}\left(1+\frac{a_0^2}{a_t^2}\right)t - \frac{\hbar^2 x_0 t}{4a_0^2 m^2 a_t^2}. \tag{V.59}$$

El paquete se inicia en reposo, como sigue de la condición inicial, pero para todo $t > 0$ existe un flujo diferente de cero en cada punto del espacio. Para tiempos pequeños la velocidad crece linealmente con el tiempo:

$$v = -\frac{q}{m}t + \frac{\hbar^2}{4m^2 a_0^4}(x - x_0)\,t. \tag{V.60}$$

El primer término es el clásico, mientras que el segundo se debe a la anchura finita del paquete, que empieza a ensancharse. Para tiempos muy grandes, $t \gg 2ma_0^2/\hbar$, la velocidad resulta

$$v = -\frac{q}{2m}t + \left(x - x_0 - \frac{2mqa_0^4}{\hbar^2}\right)\frac{1}{t}. \tag{V.61}$$

En el caso límite en que la anchura inicial del paquete gaussiano es infinita, la ecuación (V.59) se reduce a $v = -(q/m)\,t$, que coincide con (V.49), con $v_0 = 0$.

V.2. Problemas adicionales

V.11 Determine la función de onda $\psi(x,t)$ y la densidad de probabilidad $\rho(x,t)$ para el caso en que la función de onda inicial es una gaussiana que se desplaza con momento p_0 sobre el eje x,

$$\psi(x,0) = \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}\exp\left(\frac{ip_o x}{\hbar} - \frac{x^2}{2a^2}\right).$$

Discuta el límite clásico de $\rho(x,t)$.

La función de onda inicial describe partículas libres localizadas en torno al origen, con una distribución gaussiana (normal) de ancho $\sigma_x = a/\sqrt{2}$ y con momento p_0. La función de onda para un tiempo $t \geq 0$ se puede obtener utilizando el propagador de partícula libre (T4.45). Se obtiene así

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0(x')\exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}\right]dx' \\ &= \sqrt{\frac{m}{a2\pi\sqrt{\pi}i\hbar t}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t} + \frac{ip_0 x'}{\hbar} - \frac{x'^2}{2a^2}\right]dx'.\end{aligned} \tag{V.62}$$

El argumento de la exponencial puede ser reescrito en la forma

$$\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t} + \frac{ip_0 x'}{\hbar} - \frac{x'^2}{2a^2} = \frac{ima^2 - \hbar t}{2\hbar t a^2}x'^2 + i\frac{p_0 t - mx}{\hbar t}x' + i\frac{ma^2 x^2}{2\hbar t a^2},$$

con lo que resulta

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\sqrt{\pi}i\hbar a t}}\exp\left(i\frac{mx^2}{2\hbar t}\right) \\ &\quad\times\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{\hbar t - ima^2}{2\hbar t a^2}x'^2 - i\frac{mx - p_0 t}{\hbar t}x'\right]dx'.\end{aligned} \tag{V.63}$$

Para α y β dos números complejos arbitrarios, se tiene que

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2-\beta x}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}e^{\beta^2/4\alpha}, \tag{V.64}$$

con lo cual

$$\psi\left(x,t\right) = \sqrt{\frac{am}{i\sqrt{\pi}\left(\hbar t - ima^2\right)}}\exp\left[i\frac{mx^2}{2\hbar t} - \frac{a^2\left(mx-p_0t\right)^2}{2\hbar t\left(\hbar t - ima^2\right)}\right]. \tag{V.65}$$

Esta expresión puede escribirse en la forma alternativa

$$\psi\left(x,t\right) = \left[\sqrt{\pi}\left(\frac{i\hbar t}{ma}+a\right)\right]^{-\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{-\frac{x^2}{2a^2}+i\frac{p_0x}{\hbar}-i\frac{p_0^2t}{2m\hbar}}{1+\frac{i\hbar t}{ma^2}}\right]. \tag{V.66}$$

La densidad de probabilidad que corresponde a esta amplitud es

$$\rho\left(x,t\right) = \left[\pi\left(\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^2}+a^2\right)\right]^{-\frac{1}{2}}\exp\left[-\frac{\left(x-\frac{p_0t}{m}\right)^2}{a^2+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^2}}\right]. \tag{V.67}$$

Vemos que el paquete continúa siendo gaussiano todo el tiempo, pero su centro se desplaza con velocidad de grupo dada por p_0/m, mientras que su anchura vale $\sigma_x(t) = a\left(t\right)/\sqrt{2}$, con

$$a\left(t\right) = a\sqrt{1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^4}} \tag{V.68}$$

(compárese con el resultado (V.57)). Como esta anchura crece con el tiempo, el paquete se dispersa de manera ilimitada.

Al límite clásico se puede pasar formalmente en este caso tomando $\hbar \to 0$; la densidad de probabilidad se reduce a

$$\rho_{\text{clás}}\left(x,t\right) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}}\exp\left[-\frac{\left(x-\frac{p_0t}{m}\right)^2}{a^2}\right], \tag{V.69}$$

que corresponde al movimiento clásico de una partícula libre cuyo momento (constante) es p_0 y está distribuida en torno al origen con una anchura constante $a/\sqrt{2}$. Ahora el paquete no se deforma, y describe una estructura estable. Si pedimos además que la posición de la partícula esté bien definida, deberemos tomar el límite $a \to 0$, lo cual nos lleva a la representación de la delta de Dirac

$$\rho_{\text{clás}}\left(x,t\right) \to \delta\left(x-\frac{p_0t}{m}\right), \tag{V.70}$$

es decir, la probabilidad de encontrar a la partícula en cualquier punto del espacio es cero, excepto a lo largo de la trayectoria clásica $x = p_0t/m$. Esto muestra que las trayectorias de las partículas cuánticas, descritas por la distribución (V.67), estarán distribuidas alrededor de tal trayectoria clásica, pero se separan de ella para generar la distribución gaussiana de anchura $a(t)$; por lo tanto, conforme el tiempo transcurre, se hacen mayores las diferencias entre las trayectorias reales, cuánticas, y las de la partícula libre clásica.

V.12 Una función de onda que describe partículas en el interior de un pozo rectangular infinito unidimensional de ancho a tiene para el tiempo $t = 0$ una forma triangular dada por

$$\psi(x,0) = \begin{cases} bx, & 0 \leq x \leq \frac{a}{2}; \\ b(a-x), & \frac{a}{2} \leq x \leq a. \end{cases} \tag{V.71}$$

Determine la función de onda para un tiempo $t > 0$ arbitrario.

En primer lugar determinamos la constante b a partir de la condición de normalización, lo que da

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^a \psi^*(x,0)\psi(x,0)\,dx \\ &= b^2 \int_0^{a/2} x^2\,dx + b^2 \int_{a/2}^a (a-x)^2\,dx = \frac{b^2 a^3}{12}. \end{aligned} \tag{V.72}$$

De aquí,

$$b = 2\sqrt{\frac{3}{a^3}}. \tag{V.73}$$

Para $t = 0$ la densidad de probabilidad es

$$\rho(x,0) = \begin{cases} 12x^2/a^3, & 0 \leq x \leq a/2; \\ 12(a-x)^2/a^3, & a/2 \leq x \leq a. \end{cases} \tag{V.74}$$

Esta función tiene su máximo en $x = a/2$, de valor

$$\rho_{\text{máx}} = \rho\left(\frac{a}{2}\right) = \frac{3}{a}. \tag{V.75}$$

La función de onda para un tiempo t arbitrario se puede escribir en la forma

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar}, \tag{V.76}$$

con $\varphi_n(x)$ las eigenfunciones para el pozo infinito, dadas por la ecuación (T3.31),

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{\pi n x}{a}, \tag{V.77}$$

y E_n los correspondientes eigenvalores de la energía,

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2.$$

Las constantes c_n quedan determinadas por la condición inicial, es decir,

$$\psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x).$$

Usando el hecho de que las eigenfunciones son ortonormales, se obtiene

$$\begin{aligned} c_n &= \int_0^a \varphi_n(x)\,\psi(x,0)\;dx \\ &= \left(\frac{2\sqrt{6}}{a^2}\right)\left[\int_0^{a/2} x \operatorname{sen}\frac{\pi n x}{a}\,dx + \int_{a/2}^a (a-x)\operatorname{sen}\frac{\pi n x}{a}\,dx\right] \\ &= \frac{2\sqrt{6}}{a^2}\frac{2a^2}{\pi^2 n^2}\operatorname{sen}\frac{\pi n}{2}, \end{aligned}$$

es decir,

$$c_n = \left(\frac{4\sqrt{6}}{\pi^2 n^2}\right) \operatorname{sen}\frac{\pi n}{2} = (-1)^{(n-1)/2}\,\frac{4\sqrt{6}}{\pi^2 n^2}, \quad n \text{ impar.} \tag{V.78}$$

Sustituyendo en (V.76) se obtiene para la función de onda en el interior del pozo

$$\psi\,(x,t) = \sum_{n\ \text{impar}}^{\infty} (-1)^{(n-1)/2}\,\frac{4\sqrt{6}}{\pi^2 n^2}\varphi_n\,(x)\,e^{-iE_n t/\hbar}. \tag{V.79}$$

De manera análoga a los problemas III.4 o V.7, el estado $\psi\,(x,0)$ no es estacionario por no corresponder a una de las funciones propias de la ecuación estacionaria de Schrödinger del problema.

V.13 Resuelva la ecuación de Schrödinger para la partícula de masa M que rebota elásticamente a lo largo del eje vertical en el campo gravitatorio cercano a la superficie terrestre, y determine los valores propios exactos de la energía. Compare con las predicciones dadas por las reglas de Wilson-Sommerfeld, obtenidas en el problema I.20.

Una forma conveniente de proceder consiste en definir el potencial del problema como

$$V(z) = \begin{cases} Mgz, & z > 0; \\ \infty, & z \leq 0. \end{cases} \tag{V.80}$$

Esto significa que la función de onda es nula para $z \leq 0$. La ecuación de Schrödinger (multiplicada por $2M/\hbar^2$ y con $k^2 = 2ME/\hbar^2$) es

$$-\frac{d^2\varphi}{dz^2} + \left(\frac{2M^2 g}{\hbar^2}z - k^2\right)\varphi = 0. \tag{V.81}$$

Para proseguir conviene introducir una nueva variable ζ, dada por

$$c\zeta = Gz - k^2, \quad G = \frac{2M^2 g}{\hbar^2}, \tag{V.82}$$

con c una constante. Se obtiene así

$$-\frac{G^2}{c^3}\frac{d^2\varphi}{d\zeta^2} + \zeta\varphi = 0, \tag{V.83}$$

lo que sugiere escoger $c = G^{2/3}$, de manera que

$$\frac{d^2\varphi}{d\zeta^2} - \zeta\varphi = 0. \tag{V.84}$$

La solución general de esta ecuación se expresa en términos de las funciones de Airy $\mathrm{Ai}(\zeta)$ y $\mathrm{Bi}(\zeta)$; la presencia de las funciones $\mathrm{Bi}(\zeta)$ impediría que las soluciones fueran de cuadrado integrable sobre el semieje real positivo, por lo que las soluciones que se anulan en el infinito son de la forma

$$\varphi = C\mathrm{Ai}(\zeta), \tag{V.85}$$

donde C es la constante de normalización (que no se determinará aquí).[3] La condición de frontera sobre el plano $z = 0$ ($\zeta = -k^2/c$) demanda que se cumpla

$$\mathrm{Ai}(-\frac{k^2}{c}) = 0. \tag{V.86}$$

Esta condición determina los eigenvalores de la energía en términos de las raíces r_n de la función de Airy, pues de $k^2/c = \left(2ME/\hbar^2\right) G^{-2/3} = -r_n$ sigue

$$E_n = -\left(\tfrac{1}{2}Mg^2\hbar^2\right)^{1/3} r_n \equiv E_0\,|r_n|\,, \quad E_0 = \left(\tfrac{1}{2}Mg^2\hbar^2\right)^{1/3}. \tag{V.87}$$

Las raíces de la función de Airy son todas negativas, y el valor absoluto de las primeras es 2.34, 4.09, 5.52, 6.78. Estos mismos números fijan los primeros valores de E_n/E_0.

Para comparar con los resultados predichos por las reglas de cuantización de Wilson y Sommerfeld escribimos la ecuación (I.132) que da las soluciones determinadas por ellas en la forma

$$E_n^{WS} = \left(\tfrac{9}{8}\pi^2 Mg^2\hbar^2 n^2\right)^{1/3} = E_0\left(\tfrac{3}{2}\pi n\right)^{2/3}. \tag{V.88}$$

Para $n = 1, 2, 3, 4$ esta expresión da para E_n^{WS}/E_0 los valores 2.81, 4.46, 5.85, 7.08, con errores de 20, 9, 6 y 4 %, respectivamente. La relación (V.88) la podemos entender considerando que de la teoría de las funciones de Airy sigue que los ceros r_n de $\mathrm{Ai}(x)$ para valores suficientemente grandes de n están dados por la fórmula asintótica[4]

$$r_n = -\left[\tfrac{3}{8}\pi\,(4n-1)\right]^{2/3}\left[1 + \mathcal{O}(n^{-2})\right] \underset{n\to\infty}{\to} -\left(\tfrac{3}{2}\pi n\right)^{2/3}. \tag{V.89}$$

Luego las soluciones exactas y las dadas por la regla de cuantización de Wilson-Sommerfeld coinciden en el límite de grandes excitaciones, tal y como lo sugiere la determinación numérica anterior.

V.14 Demuestre que la ecuación de Schrödinger es invariante ante transformaciones de Galileo y exhiba la correspondiente regla de transformación para la función de onda.

Por simplicidad trabajaremos el caso de una sola dimensión espacial; el caso tridimensional puede obtenerse fácilmente por extensión de los resultados. Consideremos dos sistemas de referencia S y S', con S' moviéndose con velocidad uniforme v sobre el eje Ox con respecto a S. Un evento está descrito en el sistema S por las coordenadas (x, t), mientras que en el sistema S' el mismo evento se describe con las coordenadas (x', t'). La transformación que relaciona estas coordenadas se llama *transformación de Galileo*, y es

$$x = x' + vt', \qquad t' = t. \tag{V.90}$$

Un potencial externo que pueda actuar sobre las partículas deberá denotarse como $V(x, t)$ en el sistema S y como $V'(x', t')$ en el sistema S'. Es claro que deberá cumplirse

$$V(x, t) = V'\left(x', t'\right), \tag{V.91}$$

[3] La función Ai se puede expresar en términos de la función $K_{1/3}$ de Bessel, y tiene la forma $Ai(z) = \pi^{-1}\sqrt{z/3}K_{1/3}(\frac{2}{3}z^{3/2}) = \pi^{-1}\int_0^\infty \cos\left(\frac{1}{3}t^3 + zt\right) dt$. Gráficas de las eigenfunciones de los primeros niveles pueden verse en P. W. Langhoff, *Am. J. Phys.* **39** (1971) 954.

[4] Los detalles pueden consultarse en Abramowitz-Stegun (1965), p. 450.

pues el potencial debe ser el mismo en cada punto para los dos observadores, por tratarse de una función escalar. Con estas observaciones estamos en condiciones de estudiar la relación que existe entre las ecuaciones de Schödinger para ambos observadores.

En S' la ecuación de Schrödinger es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi'\left(x',t'\right)}{\partial x'^2}+V'\left(x',t'\right)\psi'\left(x',t'\right)=i\hbar\frac{\partial\psi'\left(x',t'\right)}{\partial t'}, \tag{V.92}$$

con $\psi'\left(x',t'\right)$ la función de onda en este sistema. Como el jacobiano de la transformación (V.90) es igual a uno, la densidad de probabilidad en un punto del espacio-tiempo debe ser la misma en ambos sistemas de referencia,

$$\left|\psi\left(x,t\right)\right|^2=\left|\psi'\left(x',t'\right)\right|^2. \tag{V.93}$$

De este requerimiento sigue que la regla de transformación para obtener la función de onda $\psi\left(x,t\right)$ debe ser de la forma $\psi\left(x,t\right)=e^{if}\psi'\left(x',t'\right)$, con f una función real que puede depender tanto de x como de t. De las expresiones (V.90) se obtienen las relaciones de transformación

$$\frac{\partial}{\partial x'}=\frac{\partial}{\partial x},\qquad \frac{\partial}{\partial t'}=\frac{\partial}{\partial t}+v\frac{\partial}{\partial x}, \tag{V.94}$$

las cuales, al ser sustituidas junto con (V.91) y (V.93) en (V.92), conducen a la ecuación

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[e^{-if}\psi(x,t)\right]+V(x,t)e^{-if}\psi(x,t)\\ =\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[e^{-if}\psi(x,t)\right]+i\hbar v\frac{\partial}{\partial x}\left[e^{-if}\psi(x,t)\right].\end{aligned} \tag{V.95}$$

Desarrollando se obtiene

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x,t)+i\hbar\left(\frac{\hbar}{m}\frac{\partial f}{\partial x}-v\right)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\\ +\left[\frac{i\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2-\hbar v\frac{\partial f}{\partial x}-\hbar\frac{\partial f}{\partial t}\right]\psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}.\end{aligned} \tag{V.96}$$

El requisito de que la ecuación de Schrödinger sea invariante ante las transformaciones de Galileo, o sea que las leyes cuánticas sean las mismas para todos los observadores inerciales, implica que esta última expresión debe reducirse a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi\left(x,t\right)}{\partial x^2}+V\left(x,t\right)\psi\left(x,t\right)=i\hbar\frac{\partial\psi\left(x,t\right)}{\partial t}, \tag{V.97}$$

lo cual se cumple sólo si f (que es real) satisface las condiciones

$$\frac{\hbar}{m}\frac{\partial f}{\partial x}-v=0, \tag{V.98}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}=0, \tag{V.99}$$

$$\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2-v\frac{\partial f}{\partial x}-\frac{\partial f}{\partial t}=0. \tag{V.100}$$

De la condición (V.98) sigue

$$f = \frac{mvx}{\hbar} + g(t), \tag{V.101}$$

con $g(t)$ una función que depende sólo del tiempo. Esta función puede determinarse con ayuda de la condición (V.100):

$$\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{m^2v^2}{\hbar^2}\right) - \frac{mv^2}{\hbar} - \frac{dg}{dt} = 0,$$
$$\frac{dg}{dt} = -\frac{mv^2}{2\hbar},$$

o bien, integrando,

$$g\left(t\right) = -\frac{mv^2t}{2\hbar}. \tag{V.102}$$

Colectando resultados, se concluye que la invariancia de la ecuación de Schrödinger ante transformaciones de Galileo demanda que la función de onda se transforme con la regla

$$\psi\left(x,t\right) = e^{if}\psi'\left(x',t'\right), \quad f = \frac{mvx}{\hbar} - \frac{mv^2t}{2\hbar}. \tag{V.103}$$

Nótese que para partículas libres se tiene $f = \left(px - Et\right)/\hbar$.[5]

V.15 En una discusión crítica de los fundamentos de la mecánica cuántica, A. Landé[6] asegura que la relación de de Broglie $p = h/\lambda$ es incompatible con la relatividad galileana, y por lo tanto no tiene un significado físico consistente. Utilice el resultado del problema anterior para mostrar que tal paradoja no existe.[7]

La paradoja en cuestión es la siguiente: Consideremos una partícula libre cuyo comportamiento está descrito en el sistema S' por la función de onda

$$\psi'\left(x',t'\right) = e^{i(kx'-\omega t')}. \tag{V.104}$$

Esta función describe partículas con momento y energía dados por

$$p' = \hbar k, \quad E' = \hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m}, \tag{V.105}$$

y con longitud de onda

$$\lambda' = 2\pi/k. \tag{V.106}$$

[5]Sin embargo es conveniente tener presente la siguiente observación: La conclusión respecto a la invariancia galileana de la ecuación de Schrödinger es convencional en la literatura; en realidad, si se tratara de una transformación galileana pura la fase f en la ecuación (V.103) debería ser nula. En otras palabras, aunque la ecuación de Schrödinger es invariante de Galileo, la correspondiente función de onda cambia por una fase, lo que rompe la invariancia galileana pura de la teoría. Este cambio de la fase de la función de onda no es estrictamente compatible con el comportamiento de ondas clásicas y puede dar lugar a efectos observables (como se discute, por ejemplo, en D. Dieks y G. Nienhuis, *Am. J. Phys.* **58** (1990) 650), pero es necesario para manener la invariancia de la fórmula de de Broglie, como se muestra en el siguiente problema.

[6]A. Landé, *Am. J. Phys.* **43** (1975) 701.

[7]Para mayores detalles, consúltese el artículo de J.M. Lévy-Lebond, *Am. J. Phys.* **44**, (1976) 1130.

Al combinar esta expresión con (V.105) se obtiene la relación de de Broglie

$$p' = \frac{2\pi\hbar}{\lambda'}, \tag{V.107}$$

como es de esperarse. El problema surge al observar que en una transformación galileana entre el sistema S y S' la longitud de onda permanece inalterada, pues para ondas comunes, tal como parece ser la expresión (V.104), la relación entre sus amplitudes está dada por

$$a\,(x,t) = a'\left(x',t'\right) = a'\,(x-vt,t)\,, \tag{V.108}$$

mientras que el momento sí sufre una transformación, pues adquiere el valor

$$p' = p + mv, \tag{V.109}$$

como se concluye de la derivada temporal de la primera de las ecuaciones (V.90). Así pues, la relación de de Broglie parece incompatible con la invariancia galileana.

El conflicto se resuelve cuando se toman en cuenta los resultados del problema anterior, que muestran que $\psi'\,(x',t')$ no es una amplitud de onda común, ya que no cumple con (V.108), sino que se transforma como se muestra en la ecuación (V.103), $\psi\,(x,t) = e^{if}\psi'\,(x-vt,t)$. Combinando (V.104) y (V.103) se obtiene para la función de onda en el sistema S:

$$\psi\,(x,t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\,(\hbar k + mv)\,x - \frac{i}{\hbar}\frac{(\hbar k + mv)^2\,t}{2m}\right]. \tag{V.110}$$

De aquí sigue que debe escribirse, como antes,

$$p = \hbar k + mv, \tag{V.111}$$

pero con

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\hbar k + mv}. \tag{V.112}$$

Eliminando a k entre ambas ecuaciones se llega de nuevo a la relación de de Broglie

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}.$$

En otras palabras, no es la amplitud de la onda lo que permanece invariante ante la transformación de Galileo, sino la fórmula de de Broglie. Esto parecería indicar que las ondas de de Broglie no pueden tratarse como ondas físicas usuales, con sus peculiaridades específicas. De hecho, el problema salta a la vista desde el momento mismo en que se introduce una fórmula como la de de Broglie, $\lambda = h/p$, pues: ¿desde cuál sistema de coordenadas debe medirse la velocidad que determina el valor de λ?

V.16 Encuentre las ecuaciones diferenciales que determinan el comportamiento de las funciones S y ρ estudiadas en el problema V.6. Discuta sus resultados.

Este problema es analizado parcialmente en la sección 7.1 del texto, y constituye la base de la *interpretación de Bohm* de la mecánica cuántica; parece conveniente agregar aquí un estudio preparatorio más detallado. Escribimos la función de onda en la forma de las ecuaciones (V.24), (V.25),

$$\psi = \sqrt{\rho} e^{iS}, \tag{V.113}$$

con ρ y S funciones reales de la posición y el tiempo, con lo que la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\left(\sqrt{\rho}e^{iS}\right) + V\left(\sqrt{\rho}e^{iS}\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\sqrt{\rho}e^{iS}\right). \tag{V.114}$$

Derivando,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[2\left(\boldsymbol{\nabla}\sqrt{\rho}\right)\cdot\left(\boldsymbol{\nabla}e^{iS}\right) + \sqrt{\rho}\left(\boldsymbol{\nabla}^2 e^{iS}\right) + \left(\boldsymbol{\nabla}^2\sqrt{\rho}\right)e^{iS}\right] + V\left(\sqrt{\rho}e^{iS}\right) = i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\sqrt{\rho}\right)e^{iS} + i\hbar\sqrt{\rho}\frac{\partial}{\partial t}e^{iS}. \tag{V.115}$$

Como

$$\boldsymbol{\nabla}e^{iS} = i\left(\boldsymbol{\nabla}S\right)e^{iS},$$
$$\boldsymbol{\nabla}^2 e^{iS} = \left[i\boldsymbol{\nabla}^2 S - \left(\boldsymbol{\nabla}S\right)^2\right]e^{iS},$$

queda

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[2i\boldsymbol{\nabla}\sqrt{\rho}\cdot\boldsymbol{\nabla}S + i\sqrt{\rho}\boldsymbol{\nabla}^2 S - \sqrt{\rho}\left(\boldsymbol{\nabla}S\right)^2 + \boldsymbol{\nabla}^2\sqrt{\rho}\right] + V\sqrt{\rho} = i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\sqrt{\rho}\right) - \hbar\sqrt{\rho}\frac{\partial S}{\partial t}. \tag{V.116}$$

Separando las partes real e imaginaria se llega a la pareja de ecuaciones diferenciales

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\boldsymbol{\nabla}^2\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\boldsymbol{\nabla}S\right)^2 + V = -\hbar\frac{\partial S}{\partial t}, \tag{V.117}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[2\left(\boldsymbol{\nabla}\sqrt{\rho}\right)\cdot\boldsymbol{\nabla}S + \sqrt{\rho}\boldsymbol{\nabla}^2 S\right] = \hbar\frac{\partial}{\partial t}\sqrt{\rho}. \tag{V.118}$$

Para reescribir de manera más apropiada estas expresiones, multiplicamos la segunda por $2\sqrt{\rho}$ y tomamos en cuenta que

$$2\sqrt{\rho}\boldsymbol{\nabla}\sqrt{\rho} = \boldsymbol{\nabla}\rho, \quad 2\sqrt{\rho}\frac{\partial\sqrt{\rho}}{\partial t} = \frac{\partial\rho}{\partial t}, \tag{V.119}$$

con lo que se llega a

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\hbar}{m}\left(\boldsymbol{\nabla}\rho\cdot\boldsymbol{\nabla}S + \rho\boldsymbol{\nabla}^2 S\right) = 0. \tag{V.120}$$

Con

$$\nabla\cdot\left(\rho\boldsymbol{\nabla}S\right) = \boldsymbol{\nabla}\rho\cdot\boldsymbol{\nabla}S + \rho\boldsymbol{\nabla}^2 S,$$

esta expresión se reduce a

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar}{m} \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{\nabla} S) = 0. \tag{V.121}$$

Ahora bien, como la densidad de corriente de probabilidad es (cf. ecuaciones (V.26)-(V.28))

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \boldsymbol{\nabla} \psi^* - \psi^* \boldsymbol{\nabla} \psi) = \frac{\hbar}{m} \rho \boldsymbol{\nabla} S, \tag{V.122}$$

la expresión (V.118) se reduce finalmente a la ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \tag{V.123}$$

Por otro lado, la ecuación diferencial que describe la evolución de la parte real, ecuación (V.117), puede ser reescrita en la forma

$$\hbar \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} (\boldsymbol{\nabla} S)^2 + V + V_q = 0, \tag{V.124}$$

donde se ha introducido la cantidad

$$V_q = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{\rho}} \boldsymbol{\nabla}^2 \sqrt{\rho}, \tag{V.125}$$

que Bohm llama *potencial cuántico*, pero que es más conocido como *potencial de Bohm*. Esta definición se debe a que V_q aparece en la ecuación (V.124) como un término que se suma al potencial ordinario para dar el potencial total $V + V_q$. Observemos que la ecuación (V.124), que describe el comportamiento de S, tiene la forma de la ecuación de Hamilton-Jacobi para la acción S de la mecánica clásica, pero para el potencial efectivo $V + V_q$. Debe tenerse mucho cuidado en la interpretación de estos resultados, pues las ecuaciones anteriores continúan siendo estadísticas, por lo que no describen una partícula, sino el comportamiento de un ensemble de partículas equivalentes. Así, no se trata efectivamente de una ecuación de Hamilton-Jacobi clásica para una partícula que sigue una trayectoria clásica (en el potencial efectivo), sino de una ecuación estadística que tiene la forma de la ecuación de Hamilton-Jacobi.

Muy significativo es el hecho de que el potencial V_q está determinado por la función de onda, que contiene información sobre el comportamiento del ensemble en *todos* los puntos del espacio; por lo tanto, se trata de un "potencial" no local. La aparente partícula "clásica" descrita por la ecuación (V.124) está sujeta a un comportamiento no local. Sin embargo, la anterior pareja de ecuaciones puede tomarse formalmente como una descripción alternativa de la mecánica cuántica, la que, como se señaló arriba, corresponde a la llamada "descripción causal" (aunque no local) de Bohm.

En términos de la velocidad de flujo (ecuaciones (V.28) o (T5.16b))

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{j}}{\rho} = \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{\nabla} S, \tag{V.126}$$

el gradiente de la ecuación (V.124) se puede reescribir en la forma

$$\hbar \frac{\partial \boldsymbol{\nabla} S}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\nabla} (\boldsymbol{\nabla} S)^2 + \boldsymbol{\nabla} (V + V_q) = 0, \tag{V.127}$$

es decir,

$$m\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + m\left(\mathbf{v}\cdot\nabla\right)\mathbf{v} = -\nabla\left(V + V_q\right) = \mathbf{F} + \mathbf{F}_q. \tag{V.128}$$

Esta es la ecuación de movimiento que seguiría una partícula con densidad de corriente dada por la expresión (V.122), bajo la acción de la fuerza efectiva $\mathbf{F}+\mathbf{F}_q$. Si en el límite clásico $\hbar \to 0$ se cumple que $V_q = 0$, las trayectorias obedecerán las leyes de movimiento de Newton, tal como es de esperarse. Una discusión más precisa sobre la interpretación de S desde la perspectiva cuántica se puede consultar en la sección 7.1 del texto.

V.17 Demuestre que la ecuación de Klein y Gordon para partícula libre se reduce en la aproximación no relativista a la correspondiente ecuación de Schrödinger y comente los resultados.

La ecuación de Klein y Gordon para partícula libre, ecuación T5.11,

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\Psi = \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\Psi, \tag{V.129}$$

tiene como soluciones a las ondas planas

$$\Psi = \text{const}\, e^{\pm i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)}, \tag{V.130}$$

en donde se ha escrito $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ y $\omega = E/\hbar$, con el momento y la energía de la partícula dadas por la relación relativista

$$E^2 = m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2, \tag{V.131}$$

tal y como se demuestra en el problema ilustrativo 5.4 del texto. Para pasar a la aproximación no relativista es conveniente separar la energía propia de la partícula, lo que se puede hacer comodamente escribiendo la función de onda en la forma

$$\Psi = e^{\mp imc^2t/\hbar}\psi(\mathbf{x},t), \tag{V.132}$$

con $\psi(\mathbf{x},t)$ la función de onda no relativista. Debido al signo $-$ que afecta al término ωt en (V.130), el signo $-$ (superior) en (V.132) se refiere a partículas cuya energía es $mc^2 + \ldots$, mientras que el signo $+$ (inferior) corresponde a partículas con energía $-mc^2 + \ldots$ En otras palabras, para que la teoría no relativista se refiera exclusivamente a partículas con energía total positiva, en vez de (V.132) debemos restringirnos a las soluciones de la forma

$$\Psi = e^{-imc^2t/\hbar}\psi(\mathbf{x},t). \tag{V.133}$$

Dada la simplicidad del cálculo, usaremos sin embargo la forma más general (V.132), lo que agrega un elemento útil a la discusión.

Sustituyendo (V.132) en (V.129) y simplificando, se obtiene

$$\pm i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2mc^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi. \tag{V.134}$$

Puesto que en el caso no relativista la energía E_{nr} de la partícula será pequeña comparada con mc^2, y la energía propia ya se ha extraído en la expresión (V.133), debe esperarse que $\psi(\mathbf{x},t)$ varíe lentamente con el tiempo, con frecuencia $|E_{\text{nr}}|/\hbar \ll mc^2/\hbar$. Por lo tanto, el cociente de las magnitudes de los dos

términos que aparecen en el lado izquierdo de la última ecuación es

$$\left\{\frac{\hbar^2}{2mc^2}\left|\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}\right|\right\} / \left\{\hbar\left|\frac{\partial\psi}{\partial t}\right|\right\} \approx \frac{\hbar}{2mc^2}\frac{|E_{\rm nr}|}{\hbar} = \frac{|E_{\rm nr}|}{2mc^2} \ll 1.$$

Esto conduce a despreciar la segunda derivada respecto a la primera en la ecuación (V.134), y se obtiene

$$\pm i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi. \tag{V.135}$$

Como vimos antes, para garantizar que se trata de partículas con energía (total, incluyendo la propia) positiva, debemos tomar aquí el signo superior, lo que nos conduce a la ecuación de Schrödinger de partícula libre.

El resultado muestra que la teoría de Schrödinger es la versión no relativista de la teoría cuántica, limitada a la consideración exclusiva de soluciones que corresponden a energías positivas. La corrección relativista a la energía de la partícula dada por (V.134) es aproximadamente

$$|\delta E| \simeq \frac{|E_{\rm nr}|}{2mc^2}\hbar\left|\frac{\partial\psi}{\partial t}\right| = \frac{E_{\rm nr}^2}{2mc^2} = \frac{\left(\mathbf{p}^2/2m\right)^2}{2mc^2} = \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2}. \tag{V.136}$$

Este resultado no es sino la primera corrección que viene del desarrollo de E dada por (V.131):

$$\begin{aligned} E = mc^2\left(1+\frac{\mathbf{p}^2}{m^2c^2}\right)^{1/2} &= mc^2\left[1+\frac{\mathbf{p}^2}{2m^2c^2}-\frac{1}{8}\left(\frac{\mathbf{p}^2}{m^2c^2}\right)^2+\cdots\right] \\ &= mc^2+\frac{\mathbf{p}^2}{2m}-\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2}+\cdots \end{aligned} \tag{V.137}$$

V.3. Ejercicios

V.18 Demuestre que la primera derivada de la función de onda es continua en puntos donde $V(x)$ presenta una discontinuidad finita.

V.19 En la función de onda

$$\psi(x) = \varphi(x)e^{ip_0x/\hbar}$$

con $\varphi(x)$ real, ¿cuál es el significado de la constante p_0?

V.20 Como la ecuación de Schrödinger es de primer orden respecto al tiempo, su solución $\psi(t)$ está unívocamente determinada por $\psi(0)$. Esta relación puede escribirse en la forma

$$\psi(t) = \hat{S}(t)\psi(0),$$

en donde $\hat{S}(t)$ es un operador apropiado. Demuestre que

a) si la ecuación de Schrödinger se escribe en la forma $i\hbar\partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi$, entonces $\hat{S}(t)$ satisface la ecuación $i\hbar\dot{\hat{S}}\psi = \hat{H}\psi$, y es unitario, es decir, $\hat{S}^\dagger = \hat{S}^{-1}$.

b) si el operador $\hat{H}$ no depende del tiempo, entonces $\hat{S}(t)$ tiene la forma

$$\hat{S}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}.$$

(El operador exponencial se define a través de su serie de potencias.)

V.21 Demuestre que un estado que no es estacionario no puede tener una función de onda separable de la forma $\psi(x,t) = \chi(t)\varphi(x)$.

V.22 El resultado (T5.15) para el flujo de probabilidad $\mathbf{j}(\mathbf{x},t)$ no está determinado de forma única por la ecuación de continuidad (T5.12), pues esta última tiene como solución general $\mathbf{j}(\mathbf{x},t) + \mathbf{g}(\mathbf{x},t)$, con $\mathbf{g}(\mathbf{x},t)$ una función vectorial tal que $\nabla \cdot \mathbf{g}(\mathbf{x},t) = 0$. Demuestre que si el movimiento se realiza en una sola dimensión, esta falta de unicidad formal no tiene efecto alguno y el resultado (T5.15) es prácticamente único.

V.23 Considere la ecuación de Klein-Gordon

$$\left(\boldsymbol{\nabla}^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\psi(x,t) = \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi(x,t)\,.$$

Demuestre que se satisface una ley de conservación similar a la ecuación (T5.12), con

$$\mathbf{j}(x,t) = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\boldsymbol{\nabla}\psi^* - \psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi\right).$$

¿Cuánto vale ahora $\rho(x,t)$? A partir de este resultado discuta por qué la ecuación de Klein-Gordon no es un buen candidato para sustituir a la ecuación de Schrödinger en el caso relativista.

V.24 Calcule la corriente de probabilidad para la función de onda

$$\psi(r) = \frac{e^{ikr}}{r},$$

donde $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$, y examine su comportamiento para valores de r muy grandes. Interprete su resultado.

V.25 Determine la expresión para el potencial cuántico definido en el problema V.16 para la función de onda (no normalizada)

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[ikx - \frac{i\hbar t k^2}{2m} - \tfrac{1}{2}a(k-k_0)^2\right] dk$$

y demuestre que se anula en el límite $\hbar \to 0$.

V.26 Una partícula se encuentra en su estado base en un pozo cuadrado infinito unidimensional de anchura L. Repentinamente, en $t = 0$, la pared derecha del pozo se desplaza de $x = L$ a $x = 2L$. ¿Se encuentra todavía la partícula en un estado estacionario? Calcule la probabilidad del nuevo estado base.

VI. Barreras y pozos unidimensionales

VI.1. Problemas del texto

VI.1 Muestre que para un pozo cuadrado unidimensional existen precisamente $n+1$ estados ligados pares si

$$\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}n^2 \leq V_0 < \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}\left(n+1\right)^2$$

y $n+1$ estados ligados impares si

$$\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}\left(n+\tfrac{1}{2}\right)^2 \leq V_0 < \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}\left(n+\tfrac{3}{2}\right)^2,$$

en donde $-V_0$ es la profundidad del pozo y a su anchura.

Los estados ligados pares del pozo están dados por las soluciones de la ecuación (T6.20)

$$\tan y = \frac{\sqrt{y_0^2 - y^2}}{y}, \tag{VI.1}$$

donde

$$y_0 = \frac{a}{2\hbar}\sqrt{2mV_0}, \quad y = \frac{a}{2\hbar}\sqrt{2m\left(V_0 - |E|\right)}. \tag{VI.2}$$

La posición de los ceros está dada por las intersecciones de las curvas $\sqrt{y_0^2 - y^2}/y$ y $\tan y$, como se ilustra en la figura VI.1a (que corresponde a la figura 6.6a del texto). El número de intersecciones $n+1$ es igual al máximo entero contenido en y_0/π, por lo que podemos escribir

$$n\pi \leq y_0 < (n+1)\,\pi. \tag{VI.3}$$

Por ejemplo, para $n = 0$ debe cumplirse que $0 \leq y_0 < \pi$, y de la figura VI.1a sigue que en este caso existe una única solución. Como $V_0 = 2y_0^2\hbar^2/ma^2$, elevando al cuadrado y multiplicando por $2\hbar^2/ma^2$ se obtiene

$$\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}n^2 \leq V_0 < \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}\left(n+1\right)^2, \tag{VI.4}$$

que es la condición solicitada.

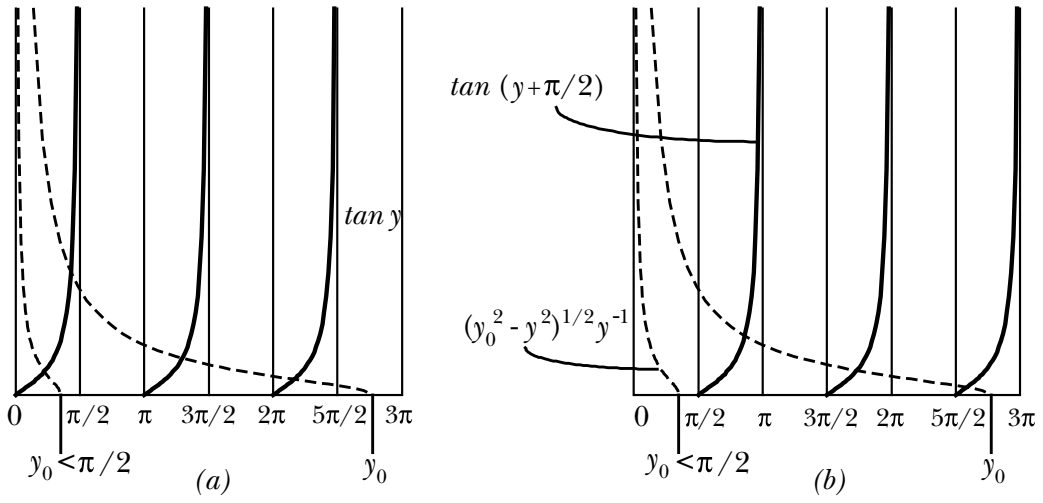


FIGURA VI.1 *Localización de los valores propios de la energía para el pozo cuadrado infinito. En (a) se muestran las soluciones pares y en (b) las impares.*

El caso impar es muy parecido; la diferencia más importante consiste en la necesidad de agregar un intervalo adicional de $\pi/2$ al parámetro y_0 en las condiciones anteriores, como se desprende claramente de la figura VI.1*b* (reproducción de la figura 6.6b del texto). Por lo tanto, si se cumple que

$$\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\pi \leq y_0 < \left(n+\tfrac{3}{2}\right)\pi, \tag{VI.5}$$

hay precisamente $n+1$ soluciones. Esta condición es equivalente a

$$\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}\left(n+\tfrac{1}{2}\right)^2 \leq V_0 < \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}\left(n+\tfrac{3}{2}\right)^2. \tag{VI.6}$$

El resultado muestra una característica general de los sistemas cuánticos: un pozo atractivo *finito* posee normalmente un número finito de estados ligados. En el problema VI.3 se muestra que no basta que la profundidad sea infinita para que exista un número infinito de estados estacionarios, pues el pozo debe ser a la vez suficientemente ancho. Esto se aprecia ya en los resultados anteriores observando que, por ejemplo, en la ecuación (VI.3) el parámetro que caracteriza cuánticamente al pozo es el producto a^2V_0, y no cada factor por separado.

Una manera alterna de realizar el análisis se obtiene notando que la ecuación (VI.1) es equivalente a

$$\cos^2 y = \frac{1}{1+\tan^2 y} = \frac{y^2}{y_0^2},$$

o

$$\cos y = \frac{y}{y_0}, \tag{VI.7}$$

cuyo estudio es más inmediato que el de la propia ecuación (VI.1).

VI.2 Una partícula se mueve en un potencial simétrico $V(x) = V(-x)$, tal que el espectro es discreto para $E < 0$ y continuo para $E > 0$. Haga una gráfica que muestre la forma general de este potencial cuando se sabe que:

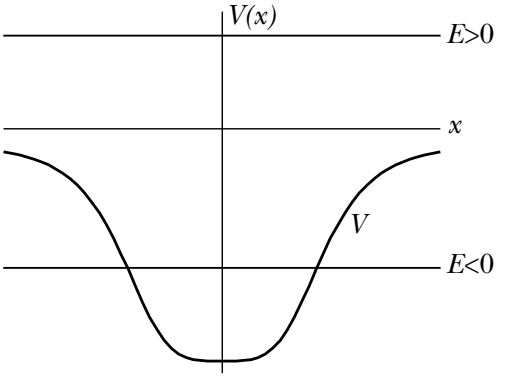


FIGURA VI.2 *Pozo de potencial simétrico que produce un espectro discreto para* $E < 0$ *y un espectro continuo para* $E > 0$.

a) existe un número infinito de estados ligados;

b) existe un número pequeño de estados ligados.

Explique su argumentación. ¿Qué sucedería si el potencial dejara de ser simétrico?

Para un potencial simétrico tal que $V(x) \leq 0 \; \forall \; x$, el espectro será continuo para $E > 0$. Los estados correspondientes a estas energías serán doblemente degenerados, pues las partículas pueden moverse hacia la derecha o hacia la izquierda. Si deseamos que para $E < 0$ los estados sean ligados, el potencial debe tener dos puntos clásicos de retorno. Estos estados son no degenerados. La forma general del potencial será como la mostrada en la figura VI.2.

En el problema anterior se demuestra que el número de estados ligados que el pozo puede contener depende tanto de la profundidad del potencial como de su anchura. Si se quiere un número finito de estados ligados, la profundidad y la anchura del potencial deben ser ambas finitas, mientras que si se quiere un número infinito de estados ligados, basta que la profundidad del potencial sea infinita, pero con anchura finita, o bien que la profundidad sea finita, pero con anchura infinita, como también se muestra en la figura VI.2.

Si el potencial deja de ser simétrico (véase el ejercicio VI.21), se siguen aplicando los razonamientos anteriores, excepto que no podemos decir nada acerca de la simetría de las eigenfunciones; podría suceder incluso que $V(x) \geq 0$, con la única condición de que para $E > 0$ sólo haya un punto clásico de retorno. La situación corresponde a la discutida en la sección 3.2 del texto e ilustrada con la figura 3.1(c) del mismo. Un sistema de mucho interés en que ocurre un número infinito de estados ligados con un potencial de profundidad finita pero anchura infinita, es el átomo de hidrógeno, que se estudia con detalle en el capítulo 13 del texto.

VI.3 Muestre que un potencial atractivo sumamente angosto y profundo que puede representarse como proporcional a una delta, $V(x) \simeq -a\delta(x)$, contiene un solo estado ligado, y calcule el correspondiente eigenvalor de la energía. *Sugerencia*: resuelva la ecuación de Schrödinger para $x \neq 0$ y tome en cuenta que ψ' no es continua en $x = 0$.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el problema es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi\left(x\right)-a\delta\left(x\right)\psi\left(x\right)=E\psi\left(x\right). \tag{VI.8}$$

Nos interesan las soluciones con $E<0$, por ser las que corresponden a posibles estados ligados. Para $x\neq 0$, esta ecuación se reduce a

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi\left(x\right)=k^2\psi\left(x\right), \tag{VI.9}$$

donde

$$k=\frac{\sqrt{2m\left|E\right|}}{\hbar}. \tag{VI.10}$$

La solución a esta ecuación es

$$\psi\left(x\right)=\left\{\begin{array}{ll} A_1e^{-kx}, & x>0; \\ A_2e^{kx}, & x<0. \end{array}\right. \tag{VI.11}$$

Se ha tomado en cuenta que la función de onda debe ser de cuadrado integrable, por lo que se han evitado los exponenciales que crecen ilimitadamente. La condición de continuidad en $x=0$ demanda que

$$A_1=A_2=A. \tag{VI.12}$$

Por otro lado, la integración directa de la ecuación de Schrödinger en una vecindad del origen da, con ε arbitrariamente pequeña y positiva,

$$\begin{aligned}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\frac{d}{dx}\frac{d\psi}{dx}dx &= \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{\varepsilon}-\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{-\varepsilon} \\ &= \frac{2m}{\hbar^2}\left[\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}V\left(x\right)\psi\left(x\right)dx-E\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi\left(x\right)dx\right]. \end{aligned}\tag{VI.13}$$

Como la función de onda $\psi\left(x\right)$ es continua, la última integral se anula en el límite $\varepsilon\rightarrow 0$; sin embargo, dado que el potencial es proporcional a la delta de Dirac, se tiene

$$\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}V\left(x\right)\psi\left(x\right)\,dx=-\frac{2ma}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\delta\left(x\right)\psi\left(x\right)\,dx=-\frac{2ma}{\hbar^2}\psi\left(0\right) \tag{VI.14}$$

y queda

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x=0^+}-\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x=0^-}=-\frac{2ma}{\hbar^2}\psi\left(0\right)=-\frac{2maA}{\hbar^2}. \tag{VI.15}$$

Este resultado muestra que la derivada de la función de onda es discontinua en el punto en que el argumento de la delta de Dirac se anula, y que el valor de esta discontinuidad es proporcional al de la función de onda ahí mismo. Evaluando las derivadas se obtiene

$$-k-k=-\frac{2ma}{\hbar^2}\Rightarrow k=\frac{ma}{\hbar^2},$$

que muestra que la demanda de continuidad fija el valor de k, y por ende, de la energía; combinando con (VI.10) se obtiene para esta última

$$E=-\frac{ma^2}{2\hbar^2}. \tag{VI.16}$$

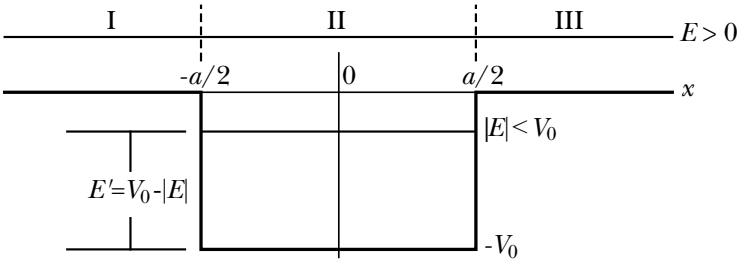


FIGURA VI.3 *Pozo rectangular unidimensional finito.*

Es claro que sólo existe un estado ligado y un eigenvalor para la energía.

La simplicidad matemática que otorga a los problemas el modelar potenciales esbeltos mediante funciones delta, como se ejemplifica aquí, se usa exitosamente en aplicaciones muy variadas para obtener de manera simple información semicuantitativa del comportamiento del sistema. Por ejemplo, se le ha usado para representar "moléculas" unidimensionales, en el modelo de redes cristalinas de Kronig-Penney, etc.[1]

VI.4 Calcule el valor de los coeficientes de reflexión y transmisión R y T a partir de las ecuaciones (T6.24) para comprobar las ecuaciones (T6.25) y (T6.26).

Las ecuaciones (T6.24) expresan las condiciones a la frontera para un pozo rectangular unidimensional de profundidad $-V_0$ ($V_0 > 0$) y anchura a, como el mostrado en la figura VI.3 (que corresponde a la figura 6.5 del texto), y son:

$$A_1 e^{-iak/2} + B_1 e^{iak/2} = A_2 e^{-iaq_1/2} + B_2 e^{iaq_1/2}, \tag{VI.17}$$

$$A_2 e^{iaq_1/2} + B_2 e^{-iaq_1/2} = A_3 e^{iak/2}, \tag{VI.18}$$

$$A_1 e^{-iak/2} - B_1 e^{iak/2} = \frac{q_1}{k}\left[A_2 e^{-iaq_1/2} - B_2 e^{iaq_1/2}\right], \tag{VI.19}$$

$$A_2 e^{iaq_1/2} - B_2 e^{-iaq_1/2} = \frac{k}{q_1} A_3 e^{iak/2}. \tag{VI.20}$$

Se ha supuesto que las partículas inciden por la izquierda, por lo que el coeficiente de reflexión es $R = |B_1/A_1|^2$, mientras que el de transmisión es $T = |A_3/A_1|^2$. Aquí

$$k^2 = 2mE/\hbar^2, \quad q_1^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2. \tag{VI.21}$$

De las ecuaciones (VI.18) y (VI.20) podemos obtener

$$A_2 = \tfrac{1}{2} A_3 \left(1 + \frac{k}{q_1}\right) e^{ia(k-q_1)/2}, \tag{VI.22}$$

$$B_2 = \tfrac{1}{2} A_3 \left(1 - \frac{k}{q_1}\right) e^{ia(k+q_1)/2}. \tag{VI.23}$$

Análogamente, de las ecuaciones (VI.17) y (VI.19) sigue

$$A_1 = \tfrac{1}{2} A_2 \left(1 + \frac{q_1}{k}\right) e^{ia(k-q_1)/2} + \tfrac{1}{2} B_2 \left(1 - \frac{q_1}{k}\right) e^{ia(k+q_1)/2}. \tag{VI.24}$$

[1] Discusiones detalladas de la dispersión por potenciales delta pueden verse en Galindo y Pascual (1978), capítulo 4 y Gasiorowicz (1974), capítulo 5.

Sustituyendo en esta última ecuación las expresiones obtenidas para A_2 y B_2, queda

$$A_1 = A_3 e^{ika}\left[\cos aq_1 + \frac{i}{2}\left(\frac{q_1}{k}+\frac{k}{q_1}\right)\operatorname{sen} aq_1\right]. \tag{VI.25}$$

De aquí que

$$|A_1|^2 = |A_3|^2\left[\cos^2 aq_1 + \tfrac{1}{4}\left(\frac{q_1}{k}+\frac{k}{q_1}\right)^2 \operatorname{sen}^2 aq_1\right]. \tag{VI.26}$$

Con ayuda de la identidad

$$\left(\frac{q_1}{k}+\frac{k}{q_1}\right)^2 = \left(\frac{q_1}{k}-\frac{k}{q_1}\right)^2 + 4 \tag{VI.27}$$

sustituida en el resultado anterior, el coeficiente de transmisión se puede escribir en la forma

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{1}{1+\tfrac{1}{4}\left(\dfrac{q_1}{k}-\dfrac{k}{q_1}\right)^2 \operatorname{sen}^2 aq_1}, \tag{VI.28}$$

que es precisamente el valor del coeficiente de transmisión, ecuación (T6.26), para $E > 0$. Algunas propiedades de este coeficiente son discutidas en la sección 6.2 del texto, donde se hace ver, en particular, la aparición de resonancias para los potenciales para los cuales $\operatorname{sen} aq_1 = 0$, etc.[2]

Calcularemos ahora el coeficiente de reflexión. De las ecuaciones (VI.17) y (VI.19) sigue

$$B_1 = \tfrac{1}{2}A_2\left(1-\frac{q_1}{k}\right)e^{-ia(q_1+k)/2} + \tfrac{1}{2}B_2\left(1+\frac{q_1}{k}\right)e^{ia(q_1-k)/2}.$$

Sustituyendo aquí las expresiones obtenidas para A_2 y B_2 se llega a

$$B_1 = \frac{i}{2}A_3\left(\frac{q_1}{k}-\frac{k}{q_1}\right)\operatorname{sen} aq_1, \tag{VI.29}$$

de donde

$$|B_1|^2 = \tfrac{1}{4}|A_3|^2\left(\frac{q_1}{k}-\frac{k}{q_1}\right)^2 \operatorname{sen}^2 aq_1. \tag{VI.30}$$

Con esta expresión y (VI.26) el coeficiente de reflexión resulta

$$R = \frac{\tfrac{1}{4}\left(\dfrac{q_1}{k}-\dfrac{k}{q_1}\right)^2 \operatorname{sen}^2 aq_1}{\cos^2 aq_1 + \tfrac{1}{4}\left(\dfrac{q_1}{k}+\dfrac{k}{q_1}\right)^2 \operatorname{sen}^2 aq_1}. \tag{VI.31}$$

Utilizando de nuevo (VI.27) podemos reescribir este resultado en la forma

$$R = \frac{\tfrac{1}{4}\left(\dfrac{q_1}{k}-\dfrac{k}{q_1}\right)^2 \operatorname{sen}^2 aq_1}{1+\tfrac{1}{4}\left(\dfrac{q_1}{k}-\dfrac{k}{q_1}\right)^2 \operatorname{sen}^2 aq_1}, \tag{VI.32}$$

[2]El tema se discute con amplitud en Galindo y Pascual (1978), capítulo 4. Véase también el problema VI.13.

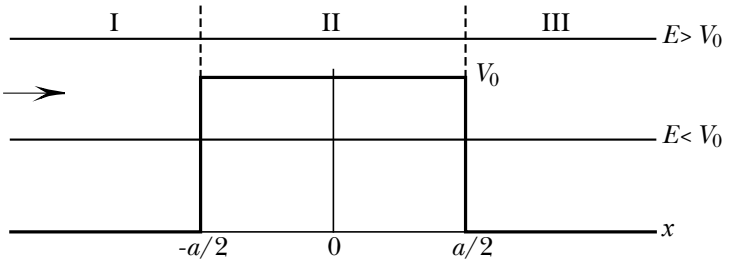


FIGURA VI.4 *Barrera rectangular unidimensional.*

o bien,

$$R = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{q_1}{k} - \frac{k}{q_1}\right)^2 \operatorname{sen}^2 aq_1}. \tag{VI.33}$$

De aquí y la ecuación (VI.28) sigue que se satisface la expresión (T6.25), es decir,

$$R + T = 1. \tag{VI.34}$$

VI.5 Derive detalladamente la fórmula (T6.46) para los coeficientes de transmisión y reflexión de partículas por una barrera rectangular para el caso $E > V_0$.

La barrera considerada se muestra en la figura VI.4 (que corresponde a la figura 6.10 del texto). La solución de la ecuación de Schrödinger para este potencial se puede escribir, para $E > V_0$, de manera similar a como se hace con la ecuación (T6.33), con los debidos cambios. Esto da:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, & x < -a/2; \\ A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}, & -a/2 < x < a/2; \\ A_3 e^{ikx}, & x > a/2, \end{cases} \tag{VI.35}$$

donde

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad q = \frac{\sqrt{2m\,(E - V_0)}}{\hbar}. \tag{VI.36}$$

Las condiciones a la frontera dan el siguiente conjunto de relaciones:

$$A_1 e^{-iak/2} + B_1 e^{iak/2} = A_2 e^{-iaq/2} + B_2 e^{iaq/2}, \tag{VI.37}$$

$$A_1 e^{-iak/2} - B_1 e^{iak/2} = \frac{q}{k}\left(A_2 e^{-iaq/2} - B_2 e^{iaq/2}\right), \tag{VI.38}$$

$$A_2 e^{iaq/2} + B_2 e^{-iaq/2} = A_3 e^{iak/2}, \tag{VI.39}$$

$$A_2 e^{iaq/2} - B_2 e^{-iaq/2} = \frac{k}{q} A_3 e^{iak/2}. \tag{VI.40}$$

De las ecuaciones (VI.39) y (VI.40) sigue que

$$A_2 = \tfrac{1}{2} A_3 \left(1 + \frac{k}{q}\right) e^{ia(k-q)/2}, \tag{VI.41}$$

$$B_2 = \tfrac{1}{2} A_3 \left(1 - \frac{k}{q}\right) e^{ia(k+q)/2}. \tag{VI.42}$$

A su vez, de las ecuaciones (VI.37) y (VI.38) se obtiene

$$A_1 = \tfrac{1}{2}A_2\left(1+\frac{q}{k}\right)e^{ia(k-q)/2} + \tfrac{1}{2}B_2\left(1-\frac{q}{k}\right)e^{ia(k+q)/2}. \tag{VI.43}$$

Sustituyendo aquí las expresiones obtenidas para A_2 y B_2, queda

$$A_1 = A_3 e^{ika}\left[\cos aq + \frac{i}{2}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)\operatorname{sen} aq\right], \tag{VI.44}$$

de donde es inmediato que

$$|A_1|^2 = |A_3|^2\left[\cos^2 aq + \tfrac{1}{4}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)^2 \operatorname{sen}^2 aq\right]. \tag{VI.45}$$

Por lo tanto, el coeficiente de transmisión resulta

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{1}{1+\left[\frac{1}{4}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)^2 - 1\right]\operatorname{sen}^2 aq}, \tag{VI.46}$$

que es lo que se deseaba demostrar. El coeficiente de reflexión se obtiene simplemente de $R = 1 - T$, lo que da

$$R = \frac{\frac{1}{4}\left(\frac{q}{k}-\frac{k}{q}\right)^2 \operatorname{sen}^2 aq}{1+\left[\frac{1}{4}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)^2 - 1\right]\operatorname{sen}^2 aq}. \tag{VI.47}$$

Nótese una vez más la aparición de resonancias, las que pueden ser muy agudas si q y k difieren mucho en valor.

VI.6 Investigue y grafique esquemáticamente las funciones de onda para el estado base y el primer estado excitado para un pozo doble como el mostrado en la figura VI.5.

El pozo doble a estudiar se muestra en la figura VI.5, que reproduce la figura 6.12 del texto. La función de onda del problema es ($l = 2a + b$)

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 \operatorname{sen} kx, & 0 < x < a; \\ A_2 e^{qx} + B_2 e^{-qx}, & a < x < a+b; \\ A_3 \operatorname{sen} k(l-x), & a+b < x < 2a+b. \end{cases} \tag{VI.48}$$

En estas expresiones ya se ha impuesto la condición $\psi(x) = 0$ en $x = 0$ y en $x = l$. La continuidad de la función de onda y de su derivada en $x = a$ y $x = a + b$ nos lleva al conjunto de ecuaciones:

$$A_1 \operatorname{sen} ka = A_2 e^{qa} + B_2 e^{-qa}, \tag{VI.49}$$

$$A_2 e^{q(a+b)} + B_2 e^{-q(a+b)} = A_3 \operatorname{sen} ka, \tag{VI.50}$$

$$kA_1 \cos ka = q\left(A_2 e^{qa} - B_2 e^{-qa}\right), \tag{VI.51}$$

$$q\left[A_2 e^{q(a+b)} - B_2 e^{-q(a+b)}\right] = -kA_3 \cos ka. \tag{VI.52}$$

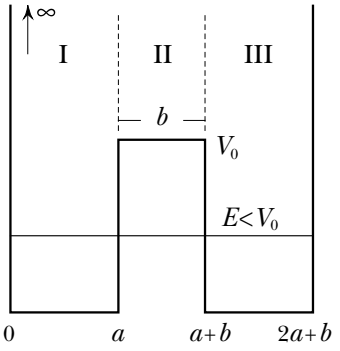


FIGURA VI.5 *Pozo doble simétrico rectangular.*

De aquí podemos obtener

$$A_1\left(\tan ka+\frac{k}{q}\right)=A_3\left(\tan ka-\frac{k}{q}\right)e^{-qb}, \tag{VI.53}$$

y

$$A_1\left(\tan ka-\frac{k}{q}\right)=A_3\left(\tan ka+\frac{k}{q}\right)e^{qb}. \tag{VI.54}$$

Este par de ecuaciones es consistente sólo si el cociente A_1/A_3 es el mismo en ambos casos, o sea

$$\left(\tan ka+\frac{k}{q}\right)^2=\left(\tan ka-\frac{k}{q}\right)^2e^{-2qb}. \tag{VI.55}$$

La condición de cuantización está dada por la raíz cuadrada de esta expresión, y es

$$\tan ka+\frac{k}{q}=\pm\left(\tan ka-\frac{k}{q}\right)e^{-qb}. \tag{VI.56}$$

Los niveles de energía del pozo están determinados por esta condición. Para estudiar algunas de sus consecuencias es conveniente reescribirla en la forma

$$\tan ka=-\frac{k}{q}\cdot\frac{1\pm e^{-qb}}{1\mp e^{-qb}}. \tag{VI.57}$$

Observamos de inmediato que si $b\to\infty$ (lo que equivale a dos pozos independientes) se recupera la expresión para el pozo finito, es decir, si k' es el valor de k correspondiente a este caso, se cumple que

$$\tan k'a+\frac{k'}{q'}=0, \tag{VI.58}$$

con

$$q'^2=\frac{2m}{\hbar^2}V_0-k'^2. \tag{VI.59}$$

Si b es finita pero con $qb\gg 1$, tomamos la primera corrección que proviene de la ecuación (VI.57), para escribir en vez de (VI.58)

$$\tan ka=-\frac{k}{q}\left(1\pm 2e^{-qb}\right). \tag{VI.60}$$

El lado derecho de esta ecuación es una cantidad pequeña. La solución en la aproximación de orden más bajo,

$$k_0 a = n\pi, \tag{VI.61}$$

corresponde a las eigenenergías del pozo infinito rectangular,

$$E_n^{(0)} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}. \tag{VI.62}$$

En la siguiente aproximación se tiene

$$ka = \pi n - \frac{k_0}{q_0}\left(1 \pm 2e^{-q_0 b}\right), \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{VI.63}$$

y

$$E_n = E_n^{(0)} - \frac{2E_n^{(0)}}{aq_0} \mp 4\frac{E_n^{(0)}}{aq_0}e^{-q_0 b} = E_n^{(1)} \mp 4\frac{E_n^{(0)}}{aq_0}e^{-q_0 b}, \tag{VI.64}$$

con

$$q_0 = \frac{\sqrt{2m\left(V_0 - E_n^{(0)}\right)}}{\hbar}. \tag{VI.65}$$

La contribución $\pi n - k_0/q_0$ es independiente de b y se refiere a cada partícula en su correspondiente pozo (aislado del otro); el término πn corresponde al pozo infinito, mientras que $-k_0/q_0$ es la corrección debida a la profundidad finita del pozo, calculada a primer orden. En esta aproximación los niveles son doblemente degenerados, pues cada partícula puede encontrarse en cualquiera de los pozos I o III de la figura VI.5. Al considerar b finita se toma en cuenta el efecto túnel a través de la barrera, lo que produce desdoblamiento de los niveles (generado por el doble signo $\pm$ en (VI.63)). Sin embargo, este desdoblamiento es en general pequeño, pues está afectado por el factor exponencial.

Con ayuda de (VI.61) y (VI.62) podemos reescribir las expresiones (VI.63) y (VI.64) en la forma

$$k_{n\pm}a = \pi n\left(1 - \frac{1}{q_0 a}\right) \pm \frac{2\pi n}{q_0 a}e^{-q_0 b}, \tag{VI.66}$$

$$E_{n\pm} = \left(1 - \frac{2}{q_0 a}\right)E_n^{(0)} \pm \frac{4e^{-q_0 b}}{q_0 a}E_n^{(0)}. \tag{VI.67}$$

De aquí sigue, en particular, que al estado base ($n = 1$) corresponden dos eigenfunciones de la forma dada en la ecuación (T6.47). Para una de ellas se tiene

$$k_{1+}a = \pi\left(1 - \frac{1}{q_0 a}\right) + \frac{2\pi}{q_0 a}e^{-q_0 b}, \tag{VI.68}$$

$$E_{1+} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1 - \frac{2}{q_0 a} + \frac{4e^{-q_0 b}}{q_0 a}\right). \tag{VI.69}$$

Para la segunda solución se tiene

$$k_{1-}a = \pi\left(1 - \frac{1}{q_0 a}\right) - \frac{2\pi}{q_0 a}e^{-q_0 b}, \tag{VI.70}$$

$$E_{1-} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1 - \frac{2}{q_0 a} - \frac{4e^{-q_0 b}}{q_0 a}\right), \tag{VI.71}$$

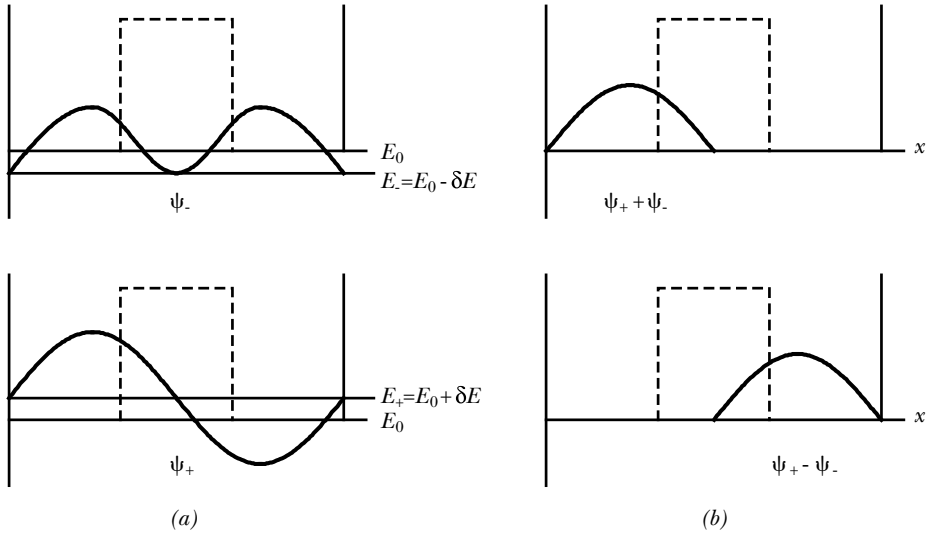


FIGURA VI.6 *Funciones de onda para $n = 1$ para el pozo rectangular doble. En (a) se muestran las soluciones deslocalizadas simétrica y antisimétrica, mientras que en (b) se muestran las soluciones que corresponden a partículas localizadas en un pozo.*

donde

$$q_0 = \frac{\sqrt{2mV_0 - \pi^2\hbar^2/a^2}}{\hbar}. \tag{VI.72}$$

De manera análoga se puede proceder con el primer estado excitado, $n = 2$. Se obtiene:

$$k_{2+}a = 2\pi\left(1 - \frac{1}{q_0 a}\right) + \frac{4\pi}{q_0 a}e^{-q_0 b}, \tag{VI.73}$$

$$E_{2+} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}\left(1 - \frac{2}{q_0 a} + \frac{4e^{-q_0 b}}{q_0 a}\right), \tag{VI.74}$$

$$k_{2-}a = 2\pi\left(1 - \frac{1}{q_0 a}\right) - \frac{4\pi}{q_0 a}e^{-q_0 b}, \tag{VI.75}$$

$$E_{2-} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}\left(1 - \frac{2}{q_0 a} - \frac{4e^{-q_0 b}}{q_0 a}\right), \tag{VI.76}$$

con

$$q_0 = \frac{\sqrt{2mV_0 - 4\pi^2\hbar^2/a^2}}{\hbar}. \tag{VI.77}$$

Las funciones de onda correspondientes a $n = 1$ se muestran de manera esquemática en la figura VI.6, la que corresponde a la figura 6.13 del texto.

La función de onda para el estado base correspondiente a la función par es

$$\psi_{1-}(x) = A_1 \operatorname{sen}\left[\frac{\pi}{a}\left(1 - \frac{1}{aq_0} - \frac{2}{aq_0}e^{-q_0 b}\right)x\right] \quad (0 < x < a), \tag{VI.78}$$

$$= A_2 e^{q_0 x} + B_2 e^{-q_0 x} \quad (a < x < a + b), \tag{VI.79}$$

$$= A_3 \operatorname{sen}\left[\frac{\pi}{a}\left(1 - \frac{1}{aq_0} - \frac{2}{aq_0}e^{-q_0 b}\right)(l - x)\right] \tag{VI.80}$$

$$(a + b < x < 2a + b)$$

y la solución impar es

$$\begin{aligned}
\psi_{1_+}(x) &= A_1 \operatorname{sen}\left[\frac{\pi}{a}\left(1-\frac{1}{aq_0}+\frac{2}{aq_0}e^{-q_0 b}\right)x\right] \quad (0<x<a)\,, & \text{(VI.81)}\\
&= A_2 e^{q_0 x}+B_2 e^{-q_0 x} \quad (a<x<a+b)\,, & \text{(VI.82)}\\
&= A_3 \operatorname{sen}\left[\frac{\pi}{a}\left(1-\frac{1}{aq_0}+\frac{2}{aq_0}e^{-q_0 b}\right)(l-x)\right] & \text{(VI.83)}\\
&\qquad\qquad (a+b<x<2a+b)\,,
\end{aligned}$$

con q_0 dada por (VI.72). Por otro lado, la función de onda par correspondiente al primer estado excitado está dada por

$$\begin{aligned}
\psi_{2_-}(x) &= A_1 \operatorname{sen}\left[\frac{2\pi}{a}\left(1-\frac{1}{aq_0}-\frac{2}{aq_0}e^{-q_0 b}\right)x\right] \quad (0<x<a)\,, & \text{(VI.84)}\\
&= A_2 e^{q_0 x}+B_2 e^{-q_0 x} \quad (a<x<a+b)\,, & \text{(VI.85)}\\
&= A_3 \operatorname{sen}\left[\frac{2\pi}{a}\left(1-\frac{1}{aq_0}-\frac{2}{aq_0}e^{-q_0 b}\right)(l-x)\right] & \text{(VI.86)}\\
&\qquad\qquad (a+b<x<2a+b)\,,
\end{aligned}$$

con q_0 dada por (VI.77). A su vez, la función de onda impar del primer estado excitado es

$$\begin{aligned}
\psi_{2_+}(x) &= A_1 \operatorname{sen}\left[\frac{2\pi}{a}\left(1-\frac{1}{aq_0}+\frac{2}{aq_0}e^{-q_0 b}\right)x\right] \quad (0<x<a)\,, & \text{(VI.87)}\\
&= A_2 e^{q_0 x}+B_2 e^{-q_0 x} \quad (a<x<a+b)\,, & \text{(VI.88)}\\
&= A_3 \operatorname{sen}\left[\frac{2\pi}{a}\left(1-\frac{1}{aq_0}+\frac{2}{aq_0}e^{-q_0 b}\right)(l-x)\right] & \text{(VI.89)}\\
&\qquad\qquad (a+b<x<2a+b)\,.
\end{aligned}$$

VI.7 En el problema anterior, determine R y T en cada pozo. Explique el resultado.

Tenemos que calcular

$$R=\frac{|J_{\text{ref}}|}{|J_{\text{inc}}|} \qquad \text{y} \qquad T=\frac{|J_{\text{trans}}|}{|J_{\text{inc}}|}. \tag{VI.90}$$

Como las funciones de onda son reales las densidades de los flujos reflejado, transmitido e incidente se anulan, $J_{\text{ref,trans,inc}}=0$ en todo punto. Esto indica que en promedio el número de partículas se mantiene constante en cada pozo, debido a que aquellas que logran fugarse por efecto túnel son compensadas por un número similar que llega del otro pozo. Esta situación corresponde a $R=1$, $T=0$. Por ejemplo, si reescribimos la función de onda (VI.78) en la forma

$$\psi_{1_-}(x)=A_1 \operatorname{sen} qx=\frac{A_1}{2i}(e^{iqx}-e^{-iqx})=A_1' e^{iqx}+B_1' e^{-iqx}, \tag{VI.91}$$

resulta $B_1'=-A_1'$ y el coeficiente de reflexión es

$$R=\left|B_1'\right|^2/\left|A_1'\right|^2=1. \tag{VI.92}$$

VI.8 Extienda el estudio del pozo rectangular finito al caso tridimensional usando coordenadas cartesianas. Muestre que si el pozo es muy profundo, se recuperan los resultados del problema ilustrativo 6.1 del texto.

Para estar en condiciones de hacer una generalización *formal* de una a tres dimensiones del problema del pozo rectangular en el sistema de coordenadas cartesianas, escribimos el potencial en la forma

$$V(x,y,z) = V(x) + V(y) + V(z) = \sum_{i=1}^{3} V_i, \tag{VI.93}$$

donde

$$V(x_i) = \begin{cases} -V_0, & \text{si } 0 < x_i < a_i; \\ 0, & \text{fuera de estos intervalos.} \end{cases} \tag{VI.94}$$

Debe quedar claro que (VI.93) *no* es un potencial cuadrado tridimensional con simetría esférica (el cual se define como $V(r) = V_0$ para $r \leq a$, $V(r) = 0$ para $r > a$), sino un potencial cuadrado en cada una de las tres direcciones ortogonales cartesianas. El potencial (VI.93) puede tomar los valores $0, -V_0, -2V_0, -3V_0$.

Sustituyendo la función $\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2)\,\psi_3(x_3)$ en la ecuación estacionaria de Schrödinger y dividiendo entre $\psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2)\,\psi_3(x_3)$ se obtiene

$$\sum_{i=1}^{3}\left(\frac{1}{\psi_i}\frac{d^2\psi_i}{dx_i^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V_i\right) = -\frac{2m}{\hbar^2}E. \tag{VI.95}$$

Debido a que cada paréntesis de la suma contiene variables independientes, la igualdad puede ser válida para toda terna (x_1, x_2, x_3) sólo si cada término es una constante, es decir, si se cumple

$$\frac{1}{\psi_i}\frac{d^2\psi_i}{dx_i^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V_i = -\frac{2m}{\hbar^2}E_i, \quad i = 1,2,3, \tag{VI.96}$$

donde las E_i son constantes tales que $E = E_1 + E_2 + E_3$. De esta manera la ecuación de Schrödinger se separa en tres ecuaciones unidimensionales, cuyas soluciones son las del pozo unidimensional finito:

$$\psi_1(x) = A_{1x}e^{\kappa_1 x}, \quad \psi_2(y) = A_{1y}e^{\kappa_2 y}, \quad \psi_3(z) = A_{1z}e^{\kappa_3 z}, \quad x,y,z < 0; \tag{VI.97}$$

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= A_{2x}\operatorname{sen} q_1 x + B_{2x}\cos q_1 x, \quad 0 \leq x \leq a; && \text{(VI.98)}\\
\psi_2(y) &= A_{2y}\operatorname{sen} q_2 x + B_{2y}\cos q_2 y, \quad 0 \leq y \leq b; && \text{(VI.99)}\\
\psi_3(z) &= A_{2z}\operatorname{sen} q_3 z + B_{2z}\cos q_3 z, \quad 0 \leq z \leq c; && \text{(VI.100)}\\
\psi_1(x) &= B_{3x}e^{-\kappa_1 x}, \quad x \geq a; && \text{(VI.101)}\\
\psi_2(y) &= B_{3y}e^{-\kappa_2 y}, \quad y \geq b; && \text{(VI.102)}\\
\psi_3(z) &= B_{3z}e^{-\kappa_3 z}, \quad z \geq c. && \text{(VI.103)}
\end{aligned}$$

Aquí se escribió $a_1 = a$, $a_2 = b$, $a_3 = c$ y

$$\kappa_i^2 = \frac{2m|E_i|}{\hbar^2}, \quad q_i^2 = \frac{2m(V_0 - |E_i|)}{\hbar^2}, \tag{VI.104}$$

$$\kappa_1^2 + \kappa_2^2 + \kappa_3^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|E|, \quad q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(3V_0 - |E|). \tag{VI.105}$$

Para definir totalmente la solución deben empalmarse apropiadamente las funciones anteriores, tal como se hace en el caso unidimensional; el proceso conduce a la cuantización de la energía, como puede esperarse.

En el límite $V_0 \to \infty$ las partículas son todas capturadas por el potencial y la función de onda se anula fuera del "pozo", lo que la reduce a

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n_1}{a}x\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n_2}{b}y\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n_3}{c}z\right). \qquad \text{(VI.106)}$$

La energía es entonces

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \ldots \qquad \text{(VI.107)}$$

Si la razón de cualquier pareja de lados es un número irracional, todos los niveles de energía son no degenerados. Para cocientes racionales el espectro de energía es, en general, degenerado. Por ejemplo, si $a = b = c$, el nivel para el cual $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 6$ es triplemente degenerado, dado que tres eigenfunciones linealmente independientes corresponden al mismo eigenvalor: $E_{121} = E_{112} = E_{211} = 6\pi^2\hbar^2/2ma^2$. El estado base E_{111} es no degenerado.

VI.9 Muestre que la matriz S que describe la dispersión de partículas por un potencial unidimensional es unitaria. Use el resultado para mostrar que deben cumplirse las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} |S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 &= 1 \\ |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2 &= 1 \\ S_{11}S_{12}^* + S_{21}S_{22}^* &= 0. \end{aligned}$$

La matriz S se define mediante la expresión

$$\psi_{\text{sal}} = S\psi_{\text{ent}}. \qquad \text{(VI.108)}$$

Consideremos la expresión

$$\psi_{\text{sal}}^\dagger \psi_{\text{sal}} = \psi_{\text{sal}}^\dagger S \psi_{\text{ent}}. \qquad \text{(VI.109)}$$

Como de (VI.108) sigue que

$$\psi_{\text{sal}}^\dagger = \psi_{\text{ent}}^\dagger S^\dagger, \qquad \text{(VI.110)}$$

se tiene que

$$\psi_{\text{sal}}^\dagger \psi_{\text{sal}} = \psi_{\text{ent}}^\dagger S^\dagger S \psi_{\text{ent}}. \qquad \text{(VI.111)}$$

Ahora imponemos la condición de que el flujo se conserve, la que podemos escribir como

$$\psi_{\text{sal}}^\dagger \psi_{\text{sal}} = \psi_{\text{ent}}^\dagger \psi_{\text{ent}}, \qquad \text{(VI.112)}$$

es decir, como condición de conservación de la normalización. Nótese que en vez de cantidades como $\psi^*\psi = |\psi|^2$ estamos considerando el producto $\psi^\dagger\psi$, pues se trata de matrices y se desea que el resultado sea un escalar. Como se explica en la sección 6.2 del texto, ψ queda representada por una matriz columna, por lo que su adjunta (igual a la traspuesta conjugada) es una matriz hilera, y el producto

$\psi^\dagger\psi$ resulta un número, como se desea. La condición (VI.112) en combinación con (VI.111) da

$$S^\dagger S = 1. \tag{VI.113}$$

Usamos este resultado para escribir $S = S\left(S^\dagger S\right) = \left(SS^\dagger\right) S$, de donde sigue que también debe cumplirse que $SS^\dagger = 1$. Combinando ambas expresiones se concluye que

$$S^\dagger = S^{-1}, \tag{VI.114}$$

que es la propiedad que define a una matriz unitaria.

Para un problema bidimensional como el ilustrado con la ecuación (T6.32), la matriz S tiene la forma

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \tag{VI.115}$$

y su adjunta es

$$S^\dagger = S^{T*} = \begin{pmatrix} S_{11}^* & S_{21}^* \\ S_{12}^* & S_{22}^* \end{pmatrix}. \tag{VI.116}$$

Insertando estas expresiones en la ecuación (VI.113) se obtiene

$$\begin{aligned} 1 &= \begin{pmatrix} S_{11}^* & S_{21}^* \\ S_{12}^* & S_{22}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} S_{11}^* S_{11} + S_{21}^* S_{21} & S_{11}^* S_{12} + S_{21}^* S_{22} \\ S_{12}^* S_{11} + S_{22}^* S_{21} & S_{12}^* S_{12} + S_{22}^* S_{22} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{VI.117}$$

De aquí sigue

$$|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 = 1, \tag{VI.118}$$
$$|S_{12}|^2 + |S_{22}|^2 = 1, \tag{VI.119}$$
$$S_{12}^* S_{11} + S_{22}^* S_{21} = 0, \tag{VI.120}$$

además de la conjugada de esta última expresión. De manera análoga, de $SS^\dagger = 1$ sigue

$$|S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 = 1, \tag{VI.121}$$
$$|S_{21}|^2 + |S_{22}|^2 = 1, \tag{VI.122}$$
$$S_{11} S_{21}^* + S_{12} S_{22}^* = 0. \tag{VI.123}$$

Todas estas relaciones son características de una matriz unitaria y pueden escribirse en la forma condensada

$$S^\dagger S = 1 \Longrightarrow \sum_j S_{ij}^* S_{jk} = \delta_{ik}; \tag{VI.124}$$
$$SS^\dagger = 1 \Longrightarrow \sum_j S_{ij} S_{jk}^* = \delta_{ik}. \tag{VI.125}$$

La segunda de estas expresiones es simplemente la compleja conjugada de la anterior.

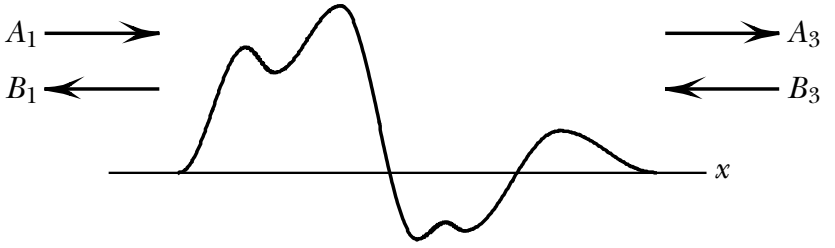


FIGURA VI.7 *Funciones de onda entrante y saliente.*

VI.10 Determine la forma general de los elementos S_{ij} de la matriz S que describe la dispersión de partículas por un pozo rectangular unidimensional con $E > 0$.

De la figura VI.7 (que reproduce la figura 6.9 del texto) vemos que es posible escribir la función de onda entrante en la forma

$$\psi_{\text{ent}} = \begin{pmatrix} A_1 \\ B_3 \end{pmatrix}, \tag{VI.126}$$

mientras que la función de onda saliente se escribe como

$$\psi_{\text{sal}} = \begin{pmatrix} A_3 \\ B_1 \end{pmatrix}. \tag{VI.127}$$

En términos de estas expresiones y (VI.115), la ecuación (VI.108) toma la forma[3]

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_3 \end{pmatrix}. \tag{VI.128}$$

Para simplificar el cálculo podemos suponer que las partículas inciden por la izquierda, de tal forma que en la región III sólo hay flujo hacia la derecha, y $B_3 = 0$; esto da

$$A_3 = S_{11}A_1, \quad B_1 = S_{21}A_1. \tag{VI.129}$$

El coeficiente de transmisión resulta entonces

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = |S_{11}|^2, \tag{VI.130}$$

[3]Debe notarse que tratamientos similares en términos de matrices (que podrían llamarse, en general, *de transferencia*) son comunes en las teorías que tratan con sistemas lineales. Por ejemplo, considere un circuito eléctrico que transforma linealmente la señal de entrada (voltaje y corriente v_1, i_1) en una señal de salida con voltaje y corriente v_2, i_2. Dada la linealidad del sistema, se puede escribir en forma totalmente general

$$v_2 = S_{11}v_1 + S_{12}i_1,$$
$$i_2 = S_{21}v_1 + S_{22}i_1.$$

Note que mientras los coeficientes S_{11} y S_{22} son adimensionales, S_{12} tiene dimensiones de impedancia y S_{21} de conductancia. Para darle forma matricial a esta expresión podemos definir un vector de entrada $V_{\text{en}} = \begin{pmatrix} v_1 \\ i_1 \end{pmatrix}$ y otro de salida $V_{\text{sal}} = \begin{pmatrix} v_2 \\ i_2 \end{pmatrix}$, y se obtiene $V_{\text{sal}} = SV_{\text{en}}$. Por ejemplo, la impedancia z_2 que presenta la salida es

$$z_2 = \frac{v_2}{i_2} = \frac{S_{11}z_1 + S_{12}}{S_{21}z_1 + S_{22}},$$

en donde $z_1 = v_1/i_1$ es la impedancia de entrada. Descripciones similares se utilizan en estudios mecánicos, acústicos, ópticos, etc.

mientras que el coeficiente de reflexión es

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = |S_{21}|^2 \,. \tag{VI.131}$$

Para continuar observamos que

$$T + R = 1 = |S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 \,, \tag{VI.132}$$

que, combinado con la ecuación (VI.121), da

$$|S_{21}|^2 = |S_{12}|^2 = R. \tag{VI.133}$$

A su vez, de (VI.122) y (VI.130) se tiene

$$|S_{22}|^2 = |S_{11}|^2 = T. \tag{VI.134}$$

Además, deberá cumplirse (VI.120), es decir,

$$S_{11}S_{12}^* + S_{21}S_{22}^* = 0. \tag{VI.135}$$

Para encontrar la solución que satisface estas condiciones escribimos los elementos de matriz en la forma

$$S_{11} = \sqrt{T}e^{i\alpha}, \quad S_{12} = \sqrt{R}e^{i\beta}, \quad S_{21} = \sqrt{R}e^{i\gamma}, \quad S_{22} = \sqrt{T}e^{i\delta}. \tag{VI.136}$$

De la condición (VI.135) sigue que debe cumplirse

$$e^{i(\alpha-\beta)} = -e^{i(\gamma-\delta)} \tag{VI.137}$$

o bien, desarrollando,

$$\cos(\alpha-\beta) + i\,\mathrm{sen}\,(\alpha-\beta) = -\cos(\gamma-\delta) - i\,\mathrm{sen}\,(\gamma-\delta)\,,$$

de donde

$$\alpha - \beta = \gamma - \delta + \pi, \quad \alpha - \beta = \delta - \gamma, \tag{VI.138}$$

o sea

$$\delta = \gamma + \frac{\pi}{2}, \quad \alpha = \beta + \frac{\pi}{2}. \tag{VI.139}$$

Así pues:

$$S_{11} = \sqrt{T}e^{i\alpha}, \quad S_{12} = \sqrt{R}e^{i\left(\alpha-\frac{\pi}{2}\right)}, \tag{VI.140}$$

$$S_{21} = \sqrt{R}e^{i\left(\delta-\frac{\pi}{2}\right)}, \quad S_{22} = \sqrt{T}e^{i\delta}. \tag{VI.141}$$

Para continuar introducimos una consideración de simetría. Hacemos una inversión espacial y denotamos los elementos que describen el sistema transformado con una raya; tenemos que

$$\bar{\psi}_{\mathrm{sal}} = \begin{pmatrix} A_1 \\ B_3 \end{pmatrix}, \quad \bar{\psi}_{\mathrm{ent}} = \begin{pmatrix} A_3 \\ B_1 \end{pmatrix}, \tag{VI.142}$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_3 \end{pmatrix} = \bar{S} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_1 \end{pmatrix}. \tag{VI.143}$$

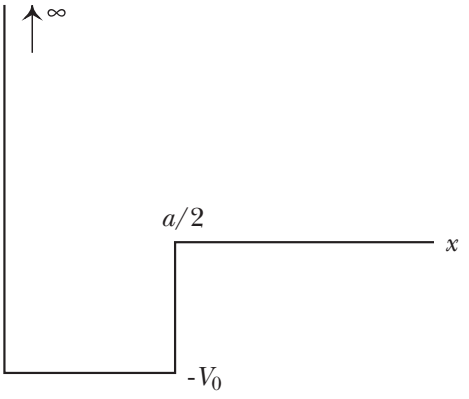


FIGURA VI.8 *Pozo rectangular finito con barrera infinita.*

Además, debe cumplirse $\bar{S} = S^{-1} = S^{\dagger}$; en el caso de un pozo simétrico debe cumplirse también $\bar{S} = S$. Combinando lo anterior resulta

$$S = S^{\dagger}, \tag{VI.144}$$

o sea que bajo estas condiciones la matriz S es además autoadjunta (hermitiana). Por lo tanto,

$$S_{11} = S_{11}^{*}, \quad S_{12} = S_{21}^{*}, \quad S_{22} = S_{22}^{*}, \tag{VI.145}$$

y sigue que

$$\alpha = 0 \qquad \text{y} \qquad \delta = \pi - \alpha = \pi. \tag{VI.146}$$

La matriz toma la forma

$$S = \begin{pmatrix} \sqrt{T} & -i\sqrt{R} \\ i\sqrt{R} & -\sqrt{T} \end{pmatrix}. \tag{VI.147}$$

Las expresiones para T y R específicas del problema están dadas por las ecuaciones (T6.25) y (T6.26).

VI.11 Demuestre que la función de onda para $x > a/2$ para una partícula con $E > 0$ sujeta al potencial mostrado en la figura VI.8 puede escribirse en la forma

$$e^{i(kx+2\delta)} - e^{-ikx}$$

y calcule los elementos de la matriz de dispersión en términos de la fase δ.

El potencial que se ilustra en la figura VI.8 corresponde a la figura 6.7 del texto. Es claro que para $x < 0$ la función de onda debe ser nula. La solución general de la ecuación de Schrödinger para el resto del espacio es:

$$\psi(x) = A_1 e^{iqx} + B_1 e^{-iqx}, \quad 0 \le x < a/2; \tag{VI.148}$$

$$\psi(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}, \quad x > a/2, \tag{VI.149}$$

donde

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + V_0\right), \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E. \tag{VI.150}$$

De la continuidad de la función de onda en $x = 0$ sigue que

$$A_1 = -B_1, \tag{VI.151}$$

mientras que de la conservación del flujo de probabilidad se obtiene la condición

$$\frac{\hbar q}{2m}\left(|A_1|^2 - |B_1|^2\right) = \frac{\hbar k}{2m}\left(|A_2|^2 - |B_2|^2\right) = 0. \tag{VI.152}$$

Combinando se llega a

$$|A_2|^2 = |B_2|^2. \tag{VI.153}$$

Proponemos escribir los coeficientes en la forma

$$A_2 = Me^{iS_1}, \quad B_2 = Me^{iS_2} = -Me^{i(S_2+\pi)}, \tag{VI.154}$$

con M, S_i constantes reales. Además, definimos una fase δ tal que

$$A_2 = e^{i(2\delta+\pi)}B_2, \tag{VI.155}$$

de tal manera que se cumple que

$$2\delta = S_1 - S_2 - \pi. \tag{VI.156}$$

Se tiene de esta manera, para $x > a/2$,

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= Me^{iS_1}e^{ikx} - Me^{i(S_2+\pi)}e^{-ikx} \\
&= Me^{i(S_2+\pi)}\left[e^{i(S_1-S_2-\pi)}e^{ikx} - e^{-ikx}\right] \\
&= Me^{i(S_2+\pi)}\left[e^{i(kx+2\delta)} - e^{-ikx}\right],
\end{aligned}$$

es decir,

$$\psi(x) = -B_2\left[e^{i(kx+2\delta)} - e^{-ikx}\right]. \tag{VI.157}$$

Éste es el resultado solicitado; sólo queda por determinar el coeficiente de normalización para conocer $\psi(x)$.

Para construir la matriz de dispersión introducimos $B_1 = -A_1$ y $B_2 = -A_2e^{-i2\delta}$ (véase (VI.155)) en (VI.128), para escribir

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ -A_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_1 \\ -A_2e^{-i2\delta} \end{pmatrix}, \tag{VI.158}$$

es decir,

$$A_2 = S_{11}A_1 - S_{12}e^{-i2\delta}A_2, \tag{VI.159}$$

$$-A_1 = S_{21}A_1 - S_{22}e^{-i2\delta}A_2. \tag{VI.160}$$

Por consiguiente

$$S_{11} = 0, \quad S_{12} = -e^{i2\delta}, \quad S_{21} = -1, \quad S_{22} = 0, \tag{VI.161}$$

y la matriz S del problema se reduce a

$$S = \begin{pmatrix} 0 & -e^{i2\delta} \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{VI.162}$$

Vemos que toda la información sobre la dispersión en la región $x > a/2$ está contenida en el desfasamiento δ dado por la ecuación (VI.156).

De la forma de la ecuación (VI.162) se deduce que la inversa de la matriz S es $S^{-1} = S^{\dagger}$, y S resulta unitaria.

VI.12 Muestre que el principio de invariancia frente a una inversión temporal implica que los coeficientes de transmisión y reflexión por un escalón rectangular son los mismos, ya sea que las partículas incidan por la derecha o por la izquierda, para una misma energía.

La inversión temporal cambia el signo del momento, por lo que para efectuarla debe hacerse la sustitución de los momentos por sus negativos. Como las fórmulas para los coeficientes de reflexión R y de transmisión T para $E > V_0$ (ecuaciones (T6.12) y (T6.13)):

$$R = \left(\frac{k - k_1}{k + k_1}\right)^2, \tag{VI.163}$$

$$T = \frac{4kk_1}{(k + k_1)^2}, \tag{VI.164}$$

son invariantes ante la transformación $k \to -k$, $k_1 \to -k_1$, lo son también ante una inversión temporal. Si consideramos ahora que las partículas inciden por la izquierda en vez de por la derecha, habrá que hacer la sustitución $k \to k_1$, $k_1 \to k$, operación que también deja invariantes los resultados que se refieren al escalón de potencial unidimensional.

Desde el punto de vista físico, se puede decir que la función de onda que describe el movimiento de las partículas y, por ende, el flujo de probabilidad, es parcialmente reflejada porque existe un cambio en el potencial. Esto se aplica independientemente de si el potencial crece o disminuye en la dirección en la que la partícula incide.

El comportamiento de los coeficientes R y T al intercambiar k y k_1 contiene una propiedad que es característica de todas las ondas, conocida en óptica como *reciprocidad*. Cuando la luz pasa perpendicularmente a través de la interfase entre dos medios con índices de refracción diferentes, una fracción de la luz es reflejada debido al cambio brusco en su longitud de onda. La misma fracción es reflejada independientemente de si la onda incide por un lado de la interfase o por el otro. Podríamos decir que sucede lo mismo cuando las partículas experimentan un cambio en su longitud de onda de de Broglie. Es decir, las ondas de de Broglie satisfacen el principio de reciprocidad.

VI.2. Problemas adicionales

VI.13 Estudie la forma de las resonancias predichas por el coeficiente de transmisión para la barrera rectangular, dado por la ecuación (VI.28).

El coeficiente de transmisión es

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{q_1}{k} - \frac{k}{q_1}\right)^2 \operatorname{sen}^2 aq_1}, \tag{VI.165}$$

donde $k^2 = 2mE/\hbar^2$, $q_1^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$. Las resonancias ocurren a las energías para las cuales $\operatorname{sen} aq_1 = 0$, es decir, para $q_1 = \pi n/a$. Consideremos valores de la energía alrededor de una de estas resonancias, de tal manera que $q_1 = q_0 + \delta q$, con $q_0 = \pi n/a$ y δq pequeña. Entonces podemos aproximar

$$\operatorname{sen} aq_1 \simeq (-1)^n a\delta q. \tag{VI.166}$$

Por otra parte,

$$q_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E_0 + V_0 + \delta E) = q_0^2 + \frac{2m}{\hbar^2}\delta E = (q_0 + \delta q)^2 \simeq q_0^2 + 2q_0\delta q, \quad \text{(VI.167)}$$

donde hemos puesto $E = E_0 + \delta E$, con E_0 la energía en la resonancia y δE la desviación de la energía desde la correspondiente resonancia. De las igualdades anteriores sigue que

$$\delta q = \frac{m}{\hbar^2 q_0}\delta E. \quad \text{(VI.168)}$$

Tenemos además que

$$\left(\frac{q_1}{k} - \frac{k}{q_1}\right)^2 = \frac{\left(q_1^2 - k^2\right)^2}{k^2 q_1^2} = \frac{\hbar^2 V_0}{2mE(E + V_0)}. \quad \text{(VI.169)}$$

Sustituyendo los resultados anteriores en el coeficiente de transmisión resulta

$$T = \frac{1}{1 + \dfrac{V_0}{16(E_0 + V_0)E(E + V_0)}\delta E^2}. \quad \text{(VI.170)}$$

Esta expresión da la dependencia en la energía cerca de las resonancias; de los diversos términos dependientes de la energía que intervienen en ella, sólo $\delta E^2 = (E - E_0)^2$ cambia rapidamente alrededor de la resonancia, mientras que su coeficiente mantiene un valor próximo a $V_0/16(E_0 + V_0)^2 E_0$. Con esta aproximación puede escribirse

$$T = \frac{1}{1 + \dfrac{V_0}{16(E_0 + V_0)^2 E_0}\delta E^2} = \frac{\frac{\Gamma^2}{4}}{\frac{\Gamma^2}{4} + (E - E_0)^2}, \quad \text{(VI.171)}$$

en donde se introdujo la cantidad

$$\Gamma = 8(E_0 + V_0)\sqrt{\frac{E_0}{V_0}}. \quad \text{(VI.172)}$$

La expresión (VI.171) se conoce como *fórmula de Breit-Wigner*; la cantidad Γ que aparece en ella es la *anchura de la resonancia*. Para $|\delta E| = \Gamma/2$ el coeficiente T se reduce a $1/2$. Vemos de (VI.172) que la anchura de las resonancias aumenta con la energía.[4]

* **VI.14** Determine la fuerza media que las partículas ejercen sobre la pared de un pozo cuadrado infinito.

Consideramos un pozo cuadrado que se extiende de $-a/2$ a $a/2$, con profundidad finita V_0 muy grande; al final pasaremos al límite $V_0 \to \infty$. En el pozo finito se aplican las definiciones (T6.17a,b), con $|E| = \varepsilon$,

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}, \quad q = \frac{\sqrt{2m\,(V_0 - \varepsilon)}}{\hbar}. \quad \text{(VI.173)}$$

Estudiaremos los estados pares, para los que debe cumplirse la condición (T6.20), o sea

$$\tan\frac{a}{2}q = \frac{\kappa}{q} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{V_0 - \varepsilon}}. \quad \text{(VI.174)}$$

[4]Este tema se estudia con mayor generalidad en la sección 20.6 del texto.

El pozo ejerce fuerza sobre las partículas sólo en las paredes, en donde la discontinuidad del potencial produce un valor infinito: $F = -dV(x)/dx = \pm V_0\delta(x \pm a/2)$; la fuerza ejercida sobre las paredes es esta misma, pero con la dirección opuesta. De aquí sigue que la fuerza media ejercida por las partículas sobre la pared de la derecha es

$$\langle F\rangle = \int V_0\delta(x-a/2)\left|\psi\right|^2 dx = V_0\left|\psi\left(a/2\right)\right|^2. \tag{VI.175}$$

Despejando la energía de (VI.174) se obtiene

$$\varepsilon = V_0\frac{\tan^2\frac{a}{2}q}{1+\tan^2\frac{a}{2}q} = V_0\,\mathrm{sen}^2\,\frac{a}{2}q. \tag{VI.176}$$

Esta energía está definida a partir del nivel superior del pozo, mientras que para pasar al límite de un pozo infinitamente profundo es más simple medirla desde el fondo, lo que se logra haciendo la sustitución

$$\varepsilon \to E = V_0 - \varepsilon = V_0\cos^2\frac{a}{2}q. \tag{VI.177}$$

Eliminando V_0 de (VI.175) con ayuda de esta expresión se obtiene

$$\langle F\rangle = \frac{E\left|\psi\left(a/2\right)\right|^2}{\cos^2\left(qa/2\right)}. \tag{VI.178}$$

Las funciones de onda pares del pozo infinito son $\sqrt{2/a}\cos\pi nx/a$, con n impar, lo que equivale a tomar en el límite $q_n = \pi n/a$. Luego, para el pozo infinito podemos escribir

$$\langle F\rangle = \frac{E_n\left|\psi_n\left(a/2\right)\right|^2}{\cos^2 q_n a/2} = \frac{2E_n}{a} = -\frac{\partial E_n}{\partial a}, \tag{VI.179}$$

en donde $E_n = \pi^2\hbar^2 n^2/2ma^2$ son los eigenvalores de la energía para el pozo cuadrado infinito.

Un análisis similar, con el mismo resultado, puede efectuarse para los niveles impares. Una manera alterna de obtener este resultado consiste en aplicar el teorema de Feynman-Hellman, discutido en la sección 14.6 del texto, partiendo de la observación de que

$$\langle F\rangle = -\frac{\partial\left\langle\hat{H}\right\rangle_n}{\partial a}. \tag{VI.180}$$

VI.15 Calcule el valor de los coeficientes de reflexión y transmisión para una barrera de potencial infinitamente angosta, que puede ser aproximada por la expresión

$$V(x) = \lambda\delta(x-b), \quad b>0.$$

Supongamos que las partículas inciden sobre la barrera por la izquierda, con energía $E>0$. La función de onda se puede escribir en la forma

$$\psi_I\left(x\right) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad x<b, \tag{VI.181}$$

$$\psi_{II}\left(x\right) = Ce^{ikx}, \quad x>b. \tag{VI.182}$$

La condición de continuidad de esta función en $x=b$, $\psi_I\left(b\right) = \psi_{II}\left(b\right)$, lleva a

$$A + Be^{-i2kb} = C. \tag{VI.183}$$

Por otra parte, procediendo como en el problema VI.3 se encuentra, para la discontinuidad de la derivada en $x = b$,

$$\psi'_{II}(b) - \psi'_{I}(b) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi_{II}(b),$$

es decir,

$$A - Be^{-i2kb} = (1 + 2i\gamma)\, C, \tag{VI.184}$$

en donde hemos puesto

$$\gamma = \frac{m\lambda}{\hbar^2 k}.$$

De la suma de (VI.183) y (VI.184) se obtiene $A = (1 + i\gamma)\, C$, o sea

$$C = \frac{1}{1 + i\gamma} A. \tag{VI.185}$$

De la diferencia de las mismas ecuaciones sigue

$$B = -i\gamma e^{i2kb} C, \tag{VI.186}$$

o, en términos de A,

$$B = \frac{-i\gamma}{1 + i\gamma} e^{i2kb} A. \tag{VI.187}$$

De los resultados anteriores se obtiene para el coeficiente de transmisión

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \gamma^2} = \frac{\left(\hbar^2 k/m\right)^2}{\left(\hbar^2 k/m\right)^2 + \lambda^2} \tag{VI.188}$$

y para el de reflexión, $R = |B|^2 / |A|^2$,

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\gamma^2}{1 + \gamma^2} = \frac{\lambda^2}{\left(\hbar^2 k/m\right)^2 + \lambda^2}. \tag{VI.189}$$

Cuando $\lambda \to \infty$, el coeficiente de transmisión se anula y nos acercamos a la reflexión total, $R \to 1$. Por otro lado, para $\lambda \to 0$ se tiene $T \to 1$, y la transmisión tiende a ser total, como es de esperarse, pues en este límite desaparece el potencial dispersor. Obsérvese que el coeficiente de reflexión es inversamente proporcional a la energía de la partícula incidente sólo si $k \gg m\lambda/\hbar^2$.

VI.16 Considere un haz colimado de partículas de masa M con energía $E > 0$ que incide por la izquierda sobre un potencial atractivo que puede modelarse con la función

$$V(x) = -v_0 \left[\delta(x) + \delta(x - a)\right], \quad v_0 > 0,\ a > 0. \tag{VI.190}$$

Determine el mínimo valor de la separación a entre los dos picos del potencial que garantiza que todas las partículas se transmitan.

Denotando las regiones con $x < 0$, $0 \leq x \leq a$, $x > a$ como I, II, III, respectivamente, las funciones de onda *en ausencia* de reflexión (coeficiente de transmisión $T = 1$) son

$$\begin{aligned} \psi_I &= A_I e^{ikx}; \\ \psi_{II} &= A_{II} e^{ikx} + B_{II} e^{-ikx}; \\ \psi_{III} &= A_{III} e^{ikx}. \end{aligned} \tag{VI.191}$$

Las condiciones de continuidad de estas funciones en $x = 0$ y $x = a$, en combinación con un procedimiento análogo al usado en el problema VI.3, conducen a la condición de compatibilidad

$$\tan \frac{a}{\hbar}\sqrt{2ME} = \frac{\hbar}{v_0}\sqrt{\frac{2E}{M}}. \tag{VI.192}$$

Por lo tanto, la mínima separación está dada por el menor arco descrito por la fórmula

$$a = \frac{\hbar}{\sqrt{2ME}} \arctan \frac{\hbar}{v_0}\sqrt{\frac{2E}{M}}. \tag{VI.193}$$

Para energías de incidencia muy bajas, tales que el arco involucrado sea muy pequeño, $a \simeq \hbar^2/Mv_0$ queda determinada por la magnitud del potencial; en el caso opuesto, de energías de incidencia muy elevadas, $a \simeq \pi\hbar/\sqrt{8ME}$ y la distancia entre picos requerida tiende a anularse. Como de (VI.192) sigue que $ka = \arctan\left(2\hbar^2E/Mv_0^2\right)^{1/2}$, en el primer caso la onda entre los dos picos prácticamente no varía, según sigue de la ecuación (VI.191), mientras que para energías muy altas se tiene $ka \simeq \pi/2$, que significa que, pese a la breve separación entre picos, el cambio de la función de onda entre ellos es muy grande.

VI.17 Se tienen partículas ligadas a un pozo cuadrado infinito cuya función de onda a $t = 0$ es la superposición

$$\psi(x, t = 0) = c_n\varphi_n(x) + c_m\varphi_m(x), \tag{VI.194}$$

donde las φ_k representan funciones propias del pozo infinito. Calcule el valor medio de x para $t > 0$.

Consideraremos que el pozo de anchura a se extiende entre $x = 0$ y $x = a$, como se hace en el capítulo 3 del texto. Para el tiempo t la función de onda es

$$\psi(x, t) = c_n\varphi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar} + c_m\varphi_m(x)e^{-iE_mt/\hbar}, \tag{VI.195}$$

donde las funciones y valores propios son (ecuaciones (T3.31) y (T3.28))

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{\pi n}{a}x, \quad E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}n^2.$$

Conviene escribir los coeficientes del desarrollo en la forma (debe tenerse cuidado en no confundir el índice m con la masa)

$$c_m = qe^{i\alpha_m}, \quad c_n = r, \quad q = \sqrt{1 - r^2}, \tag{VI.196}$$

con lo que se tiene

$$\psi(x, t) = r\varphi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar} + q\varphi_m(x)e^{-iE_mt/\hbar + i\alpha_m}. \tag{VI.197}$$

El valor medio de x resulta así

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \int \left[r\varphi_n^*(x)e^{iE_nt/\hbar} + q\varphi_m^*(x)e^{iE_mt/\hbar - i\alpha_m}\right] \\
&\qquad \times \left[r\varphi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar} + q\varphi_m(x)e^{-iE_mt/\hbar + i\alpha_m}\right] x dx \\
&= r^2\langle x\rangle_n + q^2\langle x\rangle_m \\
&\qquad + rq\int \left[e^{i\omega_{nm}t + i\alpha_m}\varphi_n^*(x)\varphi_m(x)x dx + \text{c.c.}\right],
\end{aligned} \tag{VI.198}$$

en donde $\langle x\rangle_n$ representa el valor medio de x en el estado n y análogamente para el estado m; se introdujo además la abreviatura $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$, tomando $E_n > E_m$. Como $\langle x\rangle_n = \langle x\rangle_m = a/2$ y $\varphi_n^*(x)\varphi_m(x) = \varphi_n(x)\varphi_m^*(x) = \varphi_n(x)\varphi_m(x)$, sigue que

$$\langle x\rangle = \frac{a}{2} + 2rq\cos(\omega_{nm}t + \alpha_m)\int \varphi_n^*(x)\varphi_m(x)xdx. \tag{VI.199}$$

La integral requerida es

$$\begin{aligned}\int_0^a \varphi_n^*(x)\varphi_m(x)xdx &= \frac{2}{a}\int_0^a x\,\mathrm{sen}\,\frac{\pi n}{a}x\,\mathrm{sen}\,\frac{\pi m}{a}xdx \\ &= \frac{4a}{\pi^2}\frac{nm}{(n^2-m^2)^2}\left[(-1)^{n-m}-1\right]. \end{aligned}\tag{VI.200}$$

Vemos que para $n-m$ par el término oscilatorio desaparece y se obtiene simplemente

$$\langle x\rangle = a/2, \quad n-m \text{ par}. \tag{VI.201}$$

Sin embargo, si $n-m$ es un número impar se obtiene

$$\langle x\rangle = \frac{a}{2} - \frac{16arq}{\pi^2}\frac{nm}{(n^2-m^2)^2}\cos(\omega_{nm}t+\alpha_m), \quad n-m \text{ impar}. \tag{VI.202}$$

En este caso $\langle x\rangle$ oscila armónicamente con la frecuencia ω_{nm} determinada por la diferencia de energías de los estados considerados, es decir, por la fórmula de Bohr $\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m$. El que las frecuencias de oscilación o de transición entre estados de un sistema estén determinadas por esta ley, y no por las frecuencias mecánicas o sus armónicas que un análisis clásico atribuiría al sistema, es una propiedad característica de los sistemas cuánticos, que aparece sistemáticamente en las aplicaciones.

VI.18 Considere una barrera rectangular unidimensional de altura V_0 que se extiende desde $x = 0$ hasta $x = a$, sobre la que incide un haz monoenergético estacionario de partículas desde la izquierda, dado por la función de onda entrante $\psi_{\mathsf{inc}} = e^{ikx}$, con $E < V_0$. Para determinar el tiempo promedio que las partículas se demoran en atravesar la barrera por efecto túnel se sugiere emplear la definición

$$\bar{t}_d = \int_0^a \frac{dx}{v(x)},$$

donde $v(x) = j(x)/\rho(x)$ representa la velocidad local de flujo, dada por el cociente del flujo de partículas $j(x)$ y la densidad local $\rho(x)$, con todas las cantidades calculadas dentro de la barrera, naturalmente. Note que esta definición está de acuerdo con el resultado obtenido en la sección 7.4 del texto, ecuación (T7.66). Utilícela para determinar el tiempo medio que las partículas requieren para cruzar la barrera y compare la velocidad media de tunelaje resultante con la velocidad del flujo incidente.

Con la notación de la sección 6.3 del texto escribimos la función de onda en el interior y a la derecha de la barrera, es decir, para las partículas que logran atravesarla, en la forma

$$\psi_{II}(x) = A_2e^{qx} + B_2e^{-qx}, \tag{VI.203}$$

$$\psi_{III}(x) = A_3e^{ikx}, \tag{VI.204}$$

en donde

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \tag{VI.205}$$

La continuidad de la función de onda y de su derivada en $x = a$ conduce a las condiciones

$$A_2 e^{qa} + B_2 e^{-qa} = A_3 e^{ika}, \tag{VI.206}$$

$$A_2 e^{qa} - B_2 e^{-qa} = i\frac{k}{q} A_3 e^{ika}, \tag{VI.207}$$

de las que sigue, sumando y restando,

$$A_2 = \tfrac{1}{2}\left(1 + i\frac{k}{q}\right) A_3 e^{ika - qa}, \tag{VI.208}$$

$$B_2 = \tfrac{1}{2}\left(1 - i\frac{k}{q}\right) A_3 e^{ika + qa}. \tag{VI.209}$$

El tiempo medio que las partículas tardan en cruzar la barrera por efecto túnel lo escribimos en la forma

$$\bar{t}_d = \int_0^a \frac{dx}{v_{II}(x)} = \int_0^a \frac{\rho_{II}(x)dt}{j_{II}(x)}. \tag{VI.210}$$

Considerando que se trata de un flujo estacionario unidimensional, de la ecuación de continuidad sigue que $\partial j(x)/\partial x = 0$, por lo que la densidad de flujo de partículas es constante. Su valor puede determinarse fácilmente en la región III, de donde resulta que

$$j = j_I = j_{II} = j_{III} = \frac{\hbar k}{m} |A_3|^2 = v_0 T, \tag{VI.211}$$

en donde $v_0 = \hbar k/m$ es la velocidad con que se lanzan las partículas sobre la barrera y $T = |A_3|^2$ es el coeficiente de transmisión. Combinando las expresiones anteriores y denotando con P_{II} la probabilidad de permanencia de las partículas en el interior de la barrera multiplicada por el factor de normalización $N = \int_{-\infty}^0 \rho_I(x)dx + \int_0^a \rho_{II}(x)dx + \int_a^\infty \rho_{III}(x)dx$, se obtiene

$$\bar{t}_d = \frac{1}{j}\int_0^a \rho_{II}(x)\, dx = \frac{1}{j} P_{II}. \tag{VI.212}$$

Como

$$\rho_{II} = |A_2|^2 e^{2qx} + |B_2|^2 e^{-2qx} + A_2 B_2^* + A_2^* B_2, \tag{VI.213}$$

queda

$$P_{II} = \int_0^a \rho_{II}(x)dx = \frac{|A_3|^2}{4q^2}\left[\frac{k^2 + q^2}{q}\operatorname{senh} 2qa - 2\left(k^2 - q^2\right) a\right]. \tag{VI.214}$$

Sustituyendo en (VI.212) se obtiene

$$\bar{t}_d = \frac{m}{4\hbar k q}\left(\frac{k^2 + q^2}{q^2}\operatorname{senh} 2qa - \frac{k^2 - q^2}{q^2} 2qa\right). \tag{VI.215}$$

De este resultado sigue que la velocidad promedio con que las partículas fluyen en el interior de la barrera es

$$\bar{v}_2 \equiv \frac{a}{\bar{t}_d} \equiv \frac{v_0}{\eta}, \tag{VI.216}$$

donde

$$\eta = \tfrac{1}{2}\left[1 - \frac{k^2}{q^2} + \left(1 + \frac{k^2}{q^2}\right)\frac{\operatorname{senh} 2qa}{2qa}\right]. \tag{VI.217}$$

Escribiendo esta expresión en la forma

$$\eta = 1 + \tfrac{1}{2}\left(1 + \frac{k^2}{q^2}\right)\left(\frac{\operatorname{senh} 2qa}{2qa} - 1\right) \tag{VI.218}$$

y tomando en cuenta que $\operatorname{senh} x/x \geq 1$ para $x \geq 0$, vemos que $\eta \geq 1$. Esto muestra que $\bar{v}_2 < v_0$, o sea que la barrera produce en promedio un efecto de frenado o retardo sobre el haz, aparte de la reducción de su intensidad debido a la reflección. En particular, para barreras anchas tales que $qa \gg 1$, podemos aproximar $\operatorname{senh} 2qa \simeq \frac{1}{2}e^{2qa}$, lo que significa que $\bar{t}_d$ crece exponencialmente con qa:

$$\bar{t}_d = \frac{m\left(k^2 + q^2\right)}{8\hbar k q^3} e^{2qa}. \tag{VI.219}$$

Por lo contrario, para barreras muy angostas tales que $qa \ll 1$, se puede aproximar

$$\bar{t}_d \simeq \frac{m}{4\hbar k q} 2qa \left(\frac{k^2 + q^2}{q^2} - \frac{k^2 - q^2}{q^2}\right) = \frac{ma}{\hbar k} = \frac{a}{v_0}, \tag{VI.220}$$

resultado que muestra que la barrera se vuelve prácticamente transparente a las partículas en este caso, es decir, cuando $E \simeq V_0$ o bien $a \to 0$.

El tiempo medio de permanencia definido arriba difiere de manera fundamental de otros tiempos que se encuentran en la literatura, definidos usualmente con técnicas propias de la teoría de la dispersión, como las que se estudian en el capítulo 20 del texto. Una ventaja de la presente definición, aparte de su claro sentido intuitivo, radica en que, como se vio arriba, para la barrera repulsiva el cociente $\bar{v}_2/v_0$ nunca excede la unidad, mientras que las definiciones alternas predicen velocidades arbitrariamente altas para barreras anchas.[5]

VI.19 Determine la velocidad con que fluyen las partículas en el interior y a la izquierda de la barrera de potencial del problema anterior. Demuestre que los flujos son siempre retardados por la barrera.

La solución de este problema es simple, pero altamente ilustrativa, lo que lo hace interesante. Una dificultad aparente que se aduce con frecuencia en la discusión de problemas con barreras es la siguiente. Escribiendo la ecuación de Schrödinger en la forma

$$E\psi = \frac{1}{2m}\hat{p}^2\psi + V\psi$$

y aplicándola al interior de la barrera, donde se cumple que $V > E$, se obtiene $\langle \hat{p}^2 \rangle = 2m\langle E - V \rangle < 0$, que implica que el momento de la partícula es complejo.[6]

[5] Algunas de las definiciones alternas se analizan en los trabajos de revisión de E. H. Hauge y J. A. Støvneng, *Rev. Mod. Phys.* **61** (1989) 917 y R. Landauer y Th. Martin, *Rev. Mod. Phys.* **A 49** (1994) 217.

[6] El problema adquiere un significado más preciso si se le analiza en términos de las velocidades de flujo y estocástica discutidas en el problema XXIII.8 y en el problema ilustrativo 23.1 del texto, en términos de las cuales en efecto $\langle \hat{p} \rangle$ puede adquirir valores complejos (cf. ecuación (XXIII.111)). En particular, la ecuación (XXIII.116) muestra que $\langle \hat{p}^2 \rangle$ puede tomar valores negativos en las regiones en que la velocidad estocástica es suficientemente grande o cambiante. En el análisis que se hace arriba es importante tener presente que la velocidad de flujo no determina por sí sola el valor de $\langle \hat{p} \rangle$ o de $\langle \hat{p}^2 \rangle$.

Aquí nos limitaremos a analizar el problema sólo desde la perspectiva de la velocidad de flujo, y mostrar que se obtienen resultados perfectamente aceptables.

Como introducción examinemos primero una función de onda de la forma general correspondiente a la ecuación (VI.203),

$$\psi(x) = A\varphi_1(x) + B\varphi_2(x), \quad \varphi_1, \varphi_2 \text{ reales}, \tag{VI.221}$$

o mejor

$$\psi(x) = A\left[\varphi_1(x) + C\varphi_2(x)\right], \quad C = B/A. \tag{VI.222}$$

Aunque las funciones $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$ son reales y a cada una de ellas tomadas por separado corresponde una velocidad de flujo (dada por la ecuación (V.27)) nula, si el coeficiente $C \equiv ce^{-i\beta}$ es complejo ($\beta \neq 0$), la función de onda (VI.222) resulta compleja y le corresponde una velocidad de flujo diferente de cero. Específicamente,

$$v(x) = \frac{\hbar c \operatorname{sen}\beta}{m\rho_1(x)}\left(\varphi_2\varphi_1' - \varphi_1\varphi_2'\right), \tag{VI.223}$$

con

$$\rho_1(x) = \rho(x)|_{A=1} = \varphi_1^2 + c^2\varphi_2^2 + 2c\cos\beta\varphi_1\varphi_2. \tag{VI.224}$$

Hecha esta observación, pasemos al problema de la barrera. En el interior de la barrera la función de onda es

$$\psi_{II}(x) = A_2e^{qx} + B_2e^{-qx} = A_2(e^{qx} + C_2e^{-qx}), \tag{VI.225}$$

con C_2 determinada por las ecuaciones (VI.208) y (VI.209) como

$$C_2 = \frac{q+ik}{q-ik}e^{-2qa} = (\cos\alpha + i\operatorname{sen}\alpha)\,e^{-2qa} = e^{-2qa+i\alpha}. \tag{VI.226}$$

Para escribir la última igualdad se introdujo el ángulo auxiliar α dado por

$$\cos\alpha = \frac{q^2-k^2}{q^2+k^2} = \frac{q^2-k^2}{\kappa^2}. \tag{VI.227}$$

La velocidad de flujo *en el interior* de la barrera resulta

$$v_2(x) = \frac{\hbar\kappa}{m}\frac{\operatorname{sen}\alpha\cos\alpha/2}{\cosh 2q(a-x) + \cos\alpha}. \tag{VI.228}$$

A la salida de la barrera ($x = a$) esta velocidad se reduce a la velocidad de flujo $v_0 = \hbar k/m$ con que se lanzan las partículas sobre la barrera; esto es inmediato a partir de la continuidad de la función de onda y su derivada en $x = a$, pues de (VI.223) sigue que $v_2(a) = v_3(a) = v_0$. Sin embargo cerca de la entrada a la barrera ($x \simeq 0$) la ecuación (VI.228) puede arrojar valores arbitrariamente pequeños. Por ejemplo, para el caso $qa \gg 1$ podemos aproximar $\cosh 2q(a-x) \cong \frac{1}{2}\exp(2qa) \gg 1$ y se obtiene

$$v_2(0) = \frac{\hbar\kappa}{2m}\operatorname{sen}\alpha\cos\frac{\alpha}{2}e^{-2qa}. \tag{VI.229}$$

Naturalmente, ésta es también la velocidad de flujo con la que las partículas inciden sobre la barrera, $v_1(0) = v_2(0)$. Conforme avanzan hacia la salida, las

partículas van incrementando su velocidad de flujo siguiendo la ley monótona (VI.228), hasta alcanzar el valor final v_0.

De manera análoga se puede calcular la velocidad de flujo de las partículas a la izquierda de la barrera. Se tiene

$$v_1(x) = \frac{j_1(x)}{\rho_1(x)} = \frac{v_0 T}{\rho_1(x)} = \frac{v_0(1-R)}{\rho_1(x)}, \tag{VI.230}$$

$$\rho_1(x) = 1 + R + 2\sqrt{R}\cos(2kx + 2\beta_1), \tag{VI.231}$$

en donde se ha puesto $B_1 = b_1 e^{-2i\beta_1}$ y $R = 1-T$ es el coeficiente de reflexión. De (VI.231) vemos que los valores máximo y mínimo de $\rho_1(x)$ son, respectivamente, $(1+\sqrt{R})^2$ y $(1-\sqrt{R})^2$, por lo que los correspondientes valores mínimo y máximo de $v_1(x)$ son

$$v_{1\text{máx}} = \frac{1+\sqrt{R}}{1-\sqrt{R}} v_0 \geq v_0, \tag{VI.232}$$

$$v_{1\text{mín}} = \frac{1-\sqrt{R}}{1+\sqrt{R}} v_0 \leq v_0. \tag{VI.233}$$

Aunque la velocidad $v_1(x)$ varía periódicamente entre los límites recién calculados, el efecto neto de la presencia de la barrera es producir un retardo en las partículas que penetran en ella (o la cruzan). Para convencernos de esto, consideremos un punto a la izquierda de la barrera en $x_- = -d$, $d > 0$; el tiempo medio T_d que requieren las partículas que parten de x_- para alcanzar la barrera es

$$T_d = \int_{x_1}^{0} \frac{dx}{v_1(x)} = \frac{1}{v_0 T} \int_{x_1}^{0} \rho_1(x) dx, \tag{VI.234}$$

con

$$\int_{x_1}^{0} \rho_1(x) dx = (1+R)d + \frac{\sqrt{R}}{k}\left[\text{sen}(2\beta_1) - \text{sen}(2kx + 2\beta_1)\right]. \tag{VI.235}$$

Sustituyendo y poniendo $d = v_0 T_d^0$, donde T_d^0 es el tiempo que las partículas requerirían para recorrer la distancia d en ausencia de la barrera, se obtiene

$$T_d = \frac{1+R}{T} T_d^0 + \frac{\sqrt{R}}{k v_0 T}\left[\text{sen}(2\beta_1) - \text{sen}(2kx + 2\beta_1)\right]. \tag{VI.236}$$

Podemos definir el *retardo* (*relativo*) producido en la región I como

$$\text{Ret}_1 = \lim_{d\to\infty} \frac{T_d - T_d^0}{T_d^0} = \frac{1+R}{T} - 1 = \frac{2(1-T)}{T}. \tag{VI.237}$$

Vemos que, en efecto, en todos las casos $\text{Ret}_1 \geq 0$. Para barreras transparentes $qa \ll 1$ y T es próximo a la unidad, con lo que el retardo Ret_1 resulta pequeño; sin embargo, para barreras muy opacas ($qa \gg 1$) T es próximo a 0 y Ret_1 puede adquirir valores arbitrariamente grandes, es decir, las velocidades de flujo muy bajas son dominantes. Es fácil comprobar que el efecto de retardo producido por la barrera en las zonas I y II (izquierda e interior de la barrera) es del mismo orden de magnitud. La suma de estos dos retardos define el retardo en la región III, el cual resulta siempre positivo. Es claro también que si en vez del cálculo promedio realizado aquí se utilizaran propiedades particulares del paquete

(como sus máximos, etc.) para definir los tiempos de retardo, podrían obtenerse resultados diferentes.

Vemos que en todos los casos las partículas son frenadas por la barrera y penetran a ella con velocidad de flujo que puede ser considerablemente menor que v_0. En el caso $qa \gg 1$ las partículas prácticamente se detienen frente a la barrera; en presencia de esta repulsión y con velocidad de flujo despreciable, las fluctuaciones cuánticas de la velocidad pueden hacer que un número muy considerable de partículas se regresen, dando lugar a un valor alto del coeficiente de reflexión.

VI.20 Considere un escalón de potencial en la dirección Ox, tal que $V(x<0)=0$, $V(x>0)=V_0>0$. Un haz de partículas con energía $E>V_0$ se mueve en el plano xOy e incide oblícuamente sobre el escalón, formando un ángulo θ con la normal (en la dirección $-x$).

a) Determine el valor mínimo de θ, θ_m, para el cual se obtiene reflexión total.

b) Obtenga las expresiones para los coeficientes de reflexión y transmisión para $\theta<\theta_m$.

c) Calcule el ángulo que forma el haz transmitido con la normal y derive, a partir de ese resultado y usando la analogía óptica, el índice de refracción que debe atribuirse a la zona derecha respecto de la izquierda.

En la dirección del eje Ox el problema es el de un haz que incide sobre un escalón de potencial; sobre el eje Oy, para todas las energías se trata de un movimiento libre. El momento del haz es $\mathbf{p}=\mathbf{i}p_x+\mathbf{j}p_y$ y la energía del haz incidente es $E=(p_x^2+p_y^2)/2m$. Como el haz incide formando un ángulo θ con la normal, se tiene

$$p_y = p_x \tan\theta. \tag{VI.238}$$

Por lo tanto,

$$p_x = \sqrt{2mE}\cos\theta, \quad p_y = \sqrt{2mE}\,\mathrm{sen}\,\theta. \tag{VI.239}$$

a) Hay transmisión a la zona $x>0$ cuando se cumple que

$$p_x^2 > 2mV_0. \tag{VI.240}$$

En este caso el momento de las partículas transmitidas está dado por

$$p_x'^2 = p_x^2 - 2mV_0 = p_x^2 - p_m^2, \tag{VI.241}$$

en donde hemos introducido el momento crítico $p_m=\sqrt{2mV_0}$ para el cual cesa la transmisión. De (VI.239) sigue que se alcanza el ángulo crítico cuando

$$\sqrt{2mE}\cos\theta_m = \sqrt{2mV_0}, \tag{VI.242}$$

o sea

$$\cos\theta_m = \sqrt{\frac{V_0}{E}}. \tag{VI.243}$$

Este resultado se puede expresar en la forma alternativa

$$\frac{p_y}{p_m} = \tan\theta_m = \sqrt{\frac{E-V_0}{E}}. \tag{VI.244}$$

b) Los coeficientes de reflexión y transmisión para un escalón de potencial se obtienen en la subsección 6.1.2 del texto. Con la notación ahí empleada,

$$k^2 = \frac{2mE_x}{\hbar^2} = \frac{p_x^2}{\hbar^2}, \quad {k_1}^2 = \frac{2m\,(E_x - V_0)}{\hbar^2} = \frac{p_x'^2}{\hbar^2}, \tag{VI.245}$$

se obtiene

$$R = \left(\frac{k - k_1}{k + k_1}\right)^2, \quad T = \left(\frac{2k}{k + k_1}\right)^2. \tag{VI.246}$$

Como sigue claramente de (VI.245), este caso se da sólo para $E_x = p_x^2/2m > V_0$.

c) El ángulo α con que se propagan las partículas transmitidas, cuando las hay, está dado por

$$\tan\alpha = \frac{p_y}{p_x'} = \sqrt{\frac{2mE}{p_x^2 - p_m^2}}\,\operatorname{sen}\theta = \sqrt{\frac{E\operatorname{sen}^2\theta}{E\cos^2\theta - V_0}}. \tag{VI.247}$$

De aquí sigue

$$\operatorname{sen}^2\alpha = \frac{\tan^2\alpha}{1 + \tan^2\alpha} = \frac{E}{E - V_0}\operatorname{sen}^2\theta,$$

o sea

$$\frac{\operatorname{sen}\alpha}{\operatorname{sen}\theta} = \sqrt{\frac{E}{E - V_0}}. \tag{VI.248}$$

Este resultado sugiere, por comparación con la ley de Snell de la óptica,

$$\frac{\operatorname{sen}\alpha}{\operatorname{sen}\theta} = \frac{n'}{n},$$

que se adscriba al "medio" con potencial V_0 (es decir, $x > 0$) un índice de refracción n' relativo al "medio" libre de potencial (el espacio vacío) al que podemos asignar $n = 1$, de valor

$$n' = \sqrt{\frac{E}{E - V_0}}. \tag{VI.249}$$

Debe notarse con claridad que ésta no es realmente una caracterización de un "medio", sino de un estado, en cuanto que las energías E y V_0 pueden fijarse libremente. Sin embargo, la identificación abre posibilidades muy interesantes, como la de producir en el laboratorio sistemas que se comportan como lentes de índice de refracción variable, controlados por un potencial que puede depender de la posición o el tiempo, o incluso de ambas variables simultáneamente.

Con la definición (VI.249), la ecuación (VI.244) toma la forma

$$\tan\theta_m = \frac{1}{n'}. \tag{VI.250}$$

A su vez, los coeficientes de reflexión y transmisión obtenidos en el inciso b) se pueden reescribir en términos de los ángulos de incidencia y refracción:

$$R = \left(\frac{\tan\alpha - \tan\theta}{\tan\alpha + \tan\theta}\right)^2, \quad T = \left(\frac{2\tan\alpha}{\tan\alpha + \tan\theta}\right)^2. \tag{VI.251}$$

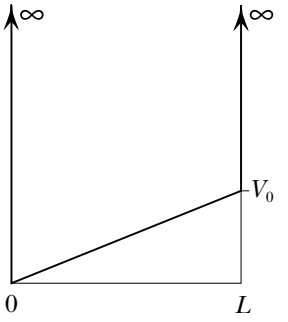


FIGURA VI.9 *Pozo para el ejercicio VI.22.*

VI.3. Ejercicios

VI.21 ¿Qué conclusiones pueden obtenerse de la paridad de las eigenfunciones de la ecuación estacionaria de Schrödinger, si la energía potencial es una función par de la posición, $V(x) = V(-x)$?

VI.22 Una partícula se mueve en un pozo como el ilustrado en la figura VI.9. Muestre cualitativamente la función de onda de los estados estacionarios $\psi_n(x)$.

VI.23 Un electrón de masa m_0 se mueve en un pozo de potencial unidimensional

$$V(x) = -\frac{\hbar^2\lambda}{m_0}\delta\left(x^2 - a^2\right),$$

donde λ es una constante adimensional positiva y a es una longitud constante. Discuta los estados ligados de este potencial como función de λ.

VI.24 Determine la matriz de dispersión para el potencial

$$V(x) = -a\delta(x - b).$$

VI.25 Considere el potencial ($V_0 > 0$)

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| \geq a \\ V_0\delta(x), & |x| < a. \end{cases}$$

Encuentre la expresión que determina los eigenvalores de la energía.

VI.26 Suponga que se tiene un protón confinado dentro de una caja cúbica de lado $L = 1$m. Calcule el número de niveles energéticos estacionarios (incluyendo la degeneración) con energía ≤ 1 MeV que contiene la caja.

VI.27 Calcule la relación que deben satisfacer la anchura y profundidad de un pozo rectangular finito, como función de n, para que las probabilidades de hallar a la partícula fuera y dentro del pozo en el estado estacionario $\psi_n(x)$ sean iguales.

VI.28 Muestre que la longitud de penetración dentro de la región externa de un pozo cuadrado de profundidad V_0 por partículas de masa m con energía E puede tomarse como $\delta = \hbar\left[2m(V_0 - |E|)\right]^{-1/2}$, de tal manera que el pozo es aproximadamente equivalente a un pozo infinito de anchura efectiva $a + 2\delta$.

VI.29 Demuestre que, debido a que k aparece solamente elevada al cuadrado en la ecuación de Schrödinger, la matriz S tiene la propiedad, como función de k, de que

$$S(k)\,S(-k) = 1.$$

VI.30 Calcule el coeficiente de reflexión para partículas de masa m y energía $E < 0$, incidentes por la izquierda sobre el potencial escalón complejo

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ (1+ia)\,V_0, & x > 0, \end{cases}$$

donde a es real y $V_0 > 0$.

VI.31 Estudie las bandas de energía en el potencial periódico

$$V(x) = g \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na), \quad g,\, a > 0.$$

VI.32 Complete el estudio realizado en el problema VI.18 analizando el caso $E > V_0$, y verifique que también en este caso se cumple que $\bar{v}_2/v_0$ nunca excede la unidad.

VII. Métodos aproximados I: método WKB, teoría y aplicaciones

VII.1. Problemas del texto

VII.1 Derive la fórmula (T7.41) para el coeficiente de transmisión T a partir de la expresión (T6.36) para una barrera rectangular, considerando la barrera de perfil arbitrario como construida por una sucesión de barreras rectangulares que en el límite se hacen infinitamente angostas.

Consideraremos que la barrera se extiende entre x_1 y x_2, y que $V(x) \geq E$, $x \in (x_1, x_2)$. Dividimos la barrera de forma arbitraria en segmentos rectangulares; los rectángulos tienen base $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ y altura $V(x_i)$. Aplicando la ecuación (T6.36) a una de las barreras cuadradas de ancho Δx_i, el coeficiente de transmisión resulta

$$T_i = \exp\left[-\frac{2\Delta x_i}{\hbar}\sqrt{2m\left(V\left(x_i\right)-E\right)}\right]. \tag{VII.1}$$

El coeficiente de transmisión T a través de la barrera completa se obtiene como el producto de los coeficientes de transmisión T_i de cada columna elemental en que se ha descompuesto el potencial; de esta manera

$$\begin{aligned} T &= \prod_{i=1}^{n} \exp\left[-\frac{2\Delta x_i}{\hbar}\sqrt{2m\left(V\left(x_i\right)-E\right)}\right] \\ &= \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}\sqrt{2m\left(V\left(x_i\right)-E\right)}\Delta x_i\right]. \end{aligned} \tag{VII.2}$$

En el límite $\Delta x_i \to 0$ se obtiene

$$\begin{aligned} T &= \lim_{\Delta x_i \to 0} \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}\sqrt{2m\left(V\left(x_i\right)-E\right)}\Delta x_i\right] \\ &= \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m\left(V\left(x\right)-E\right)}\,dx\right]; \end{aligned} \tag{VII.3}$$

éste es el resultado (T7.41) solicitado.

VII.2 Una partícula se mueve en un potencial que se anula para $|x| > a$, tiene el valor $-V_0$ en $x = 0$ y pasa de $-V_0$ a 0 linealmente en el intervalo $|x| \leq a$. Estudie los estados ligados del sistema con el método WKB.

El potencial se puede expresar en la forma

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < -a; \\ -V_0\left(\frac{x}{a}+1\right) \equiv V_1(x), & -a \leq x \leq 0; \\ V_0\left(\frac{x}{a}-1\right) \equiv V_2(x), & 0 \leq x \leq a; \\ 0, & x > a. \end{cases} \tag{VII.4}$$

Consideraremos el caso $-V_0 < E < 0$, que es la situación en que pueden existir estados ligados. Hay dos puntos clásicos de retorno, dados por

$$-V_0\left(\frac{x_1}{a}+1\right) = -E \quad \Rightarrow \quad x_1 = -\left(1 - \frac{|E|}{V_0}\right)a, \tag{VII.5}$$

$$V_0\left(\frac{x_2}{a}-1\right) = -E \quad \Rightarrow \quad x_2 = \left(1 - \frac{|E|}{V_0}\right)a. \tag{VII.6}$$

La condición WKB de cuantización, ecuación (T7.28)

$$J_n = \oint p\,dx = 2\pi\hbar\left(n + \tfrac{1}{2}\right), \tag{VII.7}$$

da en este caso

$$\begin{aligned} J_n &= \int_{x_1}^{0} \sqrt{2m\left(E_n - V_1(x)\right)}dx + \int_{0}^{x_2} \sqrt{2m\left(E_n - V_2(x)\right)}dx \\ &= \frac{4a}{3V_0}\sqrt{2m}\left(E_n + V_0\right)^{3/2} = \pi\hbar\left(n + \tfrac{1}{2}\right). \end{aligned} \tag{VII.8}$$

Los valores permitidos para la energía son, por lo tanto,

$$\begin{aligned} E_n &= -V_0 + \left(\frac{3\pi\hbar V_0}{4a\sqrt{2m}}\right)^{2/3}\left(n + \tfrac{1}{2}\right)^{2/3} \\ &= -V_0 + V_0\left(\frac{3J_n}{8a\sqrt{2mV_0}}\right)^{2/3}. \end{aligned} \tag{VII.9}$$

De esta expresión sigue que el número total de niveles discretos que puede contener el pozo es igual a $n' + 1$, donde n' es el mayor entero para el cual E_n tiene valor negativo.

De la ecuación (T7.22) sigue que la función de onda para el intervalo $x_1 < x < 0$ es

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{A}{\sqrt{p}}\,\mathrm{sen}\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) \\ &= \frac{A}{\left[2m\left(E - V_1(x)\right)\right]^{1/4}} \\ &\quad \times \mathrm{sen}\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}\sqrt{2m\left(E + V_0 + \frac{V_0}{a}x\right)}\,dx + \frac{\pi}{4}\right], \end{aligned} \tag{VII.10}$$

o sea, para $x_1 < x < 0$,

$$\psi\left(x\right) = \frac{A}{\left[2m\left(E - V_1\left(x\right)\right)\right]^{1/4}} \operatorname{sen}\left[\frac{2\sqrt{2m}a}{3\hbar V_0}\left(E + V_0 + \frac{V_0}{a}x\right)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right]. \quad \text{(VII.11)}$$

Para $0 < x < x_2$ la función de onda es

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{A}{\left[2m\left(E - V_2(x)\right)\right]^{1/4}} \\ &\quad \times \operatorname{sen}\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{0}\sqrt{2m\left(E + V_0 + \frac{V_0}{a}x\right)}\,dx \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\hbar}\int_{0}^{x}\sqrt{2m\left(E + V_0 - \frac{V_0}{a}x\right)}\,dx + \frac{\pi}{4}\right],\end{aligned}$$

o sea

$$\begin{aligned}\psi\left(x\right) &= \frac{A}{\left[2m\left(E - V_2\left(x\right)\right)\right]^{1/4}} \\ &\quad \times \operatorname{sen}\left[\frac{4\sqrt{2m}a}{3\hbar V_0}\left(E + V_0\right)^{3/2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2\sqrt{2m}a}{3\hbar V_0}\left(E + V_0 - \frac{V_0}{a}x\right)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right], \quad 0 < x < x_2.\end{aligned} \quad \text{(VII.12)}$$

Para las regiones $x < -a$ y $x > a$ externas se tiene que $|p| = \sqrt{-2mE}$ es real, por lo que las funciones de onda dejan de ser oscilatorias. Para $x < -a$ se obtiene, usando la ecuación (T7.23),

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{A}{2\left(2m\left|E\right|\right)^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{-a}\sqrt{2m\left|E\right|}\,dx\right] \\ &= \frac{A}{2\left(2m\left|E\right|\right)^{1/4}} \exp\left[\frac{\sqrt{2m\left|E\right|}}{\hbar}\left(a + x\right)\right], \quad x < -a. \quad \text{(VII.13)}\end{aligned}$$

De manera similar, para $x > a$ queda

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{A}{2\left(2m\left|E\right|\right)^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{a}^{x}\sqrt{2m\left|E\right|}\,dx\right] \\ &= \frac{A}{2\left(2m\left|E\right|\right)^{1/4}} \exp\left[-\frac{\sqrt{2m\left|E\right|}}{\hbar}\left(x - a\right)\right], \quad x > a. \quad \text{(VII.14)}\end{aligned}$$

En la región $-a < x < x_1$, que también es clásicamente prohibida, se cumple $E < V_1(x) = -V_0\left(\frac{x}{a} + 1\right)$, lo que da $|p| = \sqrt{-2m\left(E - V_1\right)}$, y la función de onda resulta

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{A}{2\sqrt{|p|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_1}|p|\;dx\right] \\ &= \frac{A}{2\left[-2m\left(E - V_1\right)\right]^{1/4}} \\ &\quad \times \exp\left[-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{x}^{x_1}\sqrt{-\left(E + V_0 + V_0 x/a\right)}\,dx\right], \quad \text{(VII.15)}\end{aligned}$$

o bien,

$$\psi\left(x\right)=\frac{A}{2\left[-2m\left(E-V_1\right)\right]^{1/4}}\exp\left[-\frac{2a\sqrt{2m}}{3\hbar V_0}\left(\left|E\right|-V_0-\frac{V_0}{a}x\right)^{3/2}\right]. \quad \text{(VII.16)}$$

A su vez, para la región $x_2<x<a$ se tiene $E<V_2(x)=V_0(x/a-1)$, por lo que $|p|=\sqrt{2m\left|E-V_2\right|}$, y la función de onda es

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{A}{2\sqrt{|p|}}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x}|p|\;dx\right]\\ &= \frac{A}{2\left[2m\left|E-V_2\right|\right]^{1/4}}\exp\left[-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{x_2}^{x}\sqrt{-\left(E+V_0-V_0\frac{x}{a}\right)}\,dx\right],\end{aligned} \quad \text{(VII.17)}$$

lo que da finalmente

$$\psi\left(x\right)=\frac{A}{2\left[2m\left|E-V_2\right|\right]^{1/4}}\exp\left[-\frac{2a\sqrt{2m}}{3\hbar V_0}\left(\left|E\right|-V_0+V_0\frac{x}{a}\right)^{3/2}\right]. \quad \text{(VII.18)}$$

VII.3 Una partícula con energía $E>V_0$ se mueve en el potencial de Hylleraas $V(x)=V_0\cosh^{-2}(x/a)$, $V_0>0$. Determine bajo qué condiciones es aplicable el método WKB y calcule el coeficiente de transmisión a través de esta barrera.

Para que el método WKB sea aplicable debe satisfacerse la condición (T7.11),

$$\frac{1}{p^2}\left|\frac{dp}{dx}\right|\ll\hbar^{-1}. \quad \text{(VII.19)}$$

Para el potencial $V\left(x\right)=V_0\cosh^{-2}\left(x/a\right)$, con $V_0>0$, el momento de la partícula es

$$p=\sqrt{2m\left(E-\frac{V_0}{\cosh^2 x/a}\right)}$$

y su derivada vale

$$\frac{dp}{dx}=\frac{2mV_0}{ap(x)}\frac{\operatorname{senh}x/a}{\cosh^3 x/a}.$$

De (VII.19) sigue que el método WKB es aplicable a este problema siempre y cuando

$$\frac{\hbar}{\left(2mE\right)^{1/2}a}\frac{V_0}{E}\frac{\left|\operatorname{senh}x/a\right|}{\left(\cosh^2 x/a-V_0/E\right)^{3/2}}\ll 1. \quad \text{(VII.20)}$$

Esta condición se puede satisfacer fácilmente en las regiones lejanas a la barrera, caracterizadas por $|x/a|\gg 1$, donde se puede aproximar $\operatorname{senh}x/a\simeq\cosh x/a\simeq e^{x/a}/2$. Para la región en que se encuentra la barrera, que es la de interés en el presente caso, y suponiendo que el cociente V_0/E no difiere demasiado de la unidad, la condición demanda que

$$\left(\frac{E}{V_0}\right)^3\gg\frac{\hbar^2}{2ma^2V_0}. \quad \text{(VII.21)}$$

El coeficiente de transmisión a través de la barrera se puede escribir en la forma[1]

$$T = e^{i\delta(E)}, \tag{VII.22}$$

$$\delta(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\sqrt{E-V}-\sqrt{E}\right)dx. \tag{VII.23}$$

Para el presente caso resulta una integral complicada:

$$\delta(E) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\sqrt{1-\frac{V_0}{E\cosh^2 x/a}}-1\right)dx. \tag{VII.24}$$

Podemos estimar el valor de esta integral para V_0/E suficientemente pequeño, considerando que como $\cosh^2(x/a) \geq 1$, en una primera aproximación

$$\delta(E) \simeq -\frac{V_0\sqrt{2mE}}{E\hbar}\int_0^{\infty}\frac{dx}{\cosh^2 x/a} = -\frac{aV_0}{2\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}B\left(\tfrac{1}{2},1\right), \tag{VII.25}$$

donde $B(x,y)$ es una función beta. Usando ahora la fórmula que relaciona a la función beta con funciones gamma,

$$B(x,y) = \int_0^1 t^{x-1}(1-t)^{y-1}dt = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}, \quad x,y>0, \tag{VII.26}$$

se obtiene

$$\delta(E) \simeq -\frac{aV_0}{2\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma(1)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} = -\frac{aV_0}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}. \tag{VII.27}$$

De aquí que el coeficiente de transmisión para $E > V_0$ es

$$T \simeq \exp\left(-i\frac{aV_0}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}\right). \tag{VII.28}$$

Vemos que $|T|^2 \simeq 1$, es decir, que aunque la barrera puede afectar sustancialmente la fase de la función de onda que la cruza, modifica poco su amplitud. En el problema VII.10 se analiza el caso complementario $E < V_0$ y se muestra que en este caso la absorción es importante. Ahí mismo se calcula de manera exacta una integral del tipo de la que aparece en la ecuación (VII.24).

VII.4 Utilice el método WKB para establecer las condiciones de cuantización para partículas que se mueven en el interior de un pozo, una de cuyas paredes es impenetrable, por lo que la función de onda se anula en ella.

Consideremos un pozo de potencial con puntos de retorno en $x_1 = 0$ (donde se coloca la pared impenetrable) y $x_2 > 0$. La función de onda en el interior del pozo puede escribirse en la forma dada por la ecuación (T7.22):

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p}}\operatorname{sen}\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right]. \tag{VII.29}$$

[1] Una discusión amplia del cálculo de este coeficiente puede verse en Saxon (1968).

Por ser infinito el potencial en el punto $x = 0$, la función de onda deberá anularse en él, lo que da

$$\psi(0) = \frac{A}{\sqrt{p}} \operatorname{sen}\left[\frac{1}{\hbar}\int_0^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right] = 0. \tag{VII.30}$$

Esta condición se puede cumplir si y sólo si

$$\frac{1}{\hbar}\int_0^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{4} = (n+1)\,\pi, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{VII.31}$$

o bien,

$$\int_0^{x_2} p\,dx = \pi\hbar\left(n + \tfrac{3}{4}\right). \tag{VII.32}$$

Considerando que 0 y x_2 son los puntos clásicos de retorno, este resultado se puede reescribir en la forma más convencional

$$J_n = \oint p\,dx = 2\pi\hbar\left(n + \tfrac{3}{4}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{VII.33}$$

VII.5 Utilice el método WKB para determinar las reglas de cuantización para el problema de una partícula que cae con aceleración g cerca de la superficie terrestre, y que es perfectamente reflejada al chocar con el suelo.

Esta es una aplicación del problema anterior, y su regla de cuantización es la ecuación (VII.33). Considerando que $V = mgz$ y que los puntos de retorno son $z_1 = 0$ y $z_2 = E/mg$, se obtiene

$$J = \oint pdz = 2\int_{z_1}^{z_2} \sqrt{2m\,(E - mgz)}dz = \frac{4}{3g}\sqrt{\frac{2}{m}}E^{3/2} = 2\pi\hbar\left(n + \tfrac{3}{4}\right). \tag{VII.34}$$

Despejando de aquí la energía, se llega a

$$E_n = \left(\frac{3\pi}{2}\hbar g\sqrt{\frac{m}{2}}\right)^{2/3}\left(n + \tfrac{3}{4}\right)^{2/3} = \left(\tfrac{4}{3}\right)^{2/3} E_0\left(n + \tfrac{3}{4}\right)^{2/3}. \tag{VII.35}$$

Es interesante comparar este resultado con el obtenido en el problema I.20.

La función de onda en el intervalo $0 < z < E/mg$ es

$$\begin{aligned}\psi(z) &= \frac{A}{\sqrt{p}} \operatorname{sen}\left[\frac{1}{\hbar}\int_z^{z_2} pdz + \frac{\pi}{4}\right] \\ &= \frac{A}{[2m(E-mgz)]^{1/4}} \\ &\quad \times \operatorname{sen}\left[-\frac{2}{3g\hbar}\sqrt{\frac{2}{m}}\,(E-mgz)^{3/2}\Big|_z^{z_2} + \frac{\pi}{4}\right],\end{aligned}$$

es decir,

$$\psi_n(z) = \frac{A_n}{[2m\,(E_n - mgz)]^{1/4}} \operatorname{sen}\left[\frac{2}{3g\hbar}\sqrt{\frac{2}{m}}\,(E_n - mgz)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right]. \tag{VII.36}$$

El coeficiente de normalización A_n se puede determinar de manera aproximada usando la condición

$$\tfrac{1}{2}A^2\int_0^{z_2} \frac{dz}{\sqrt{2m\,(E - mgz)}} = 1,$$

que da

$$A_n = \sqrt{mg\left(\frac{2m}{E_n}\right)^{1/2}}. \tag{VII.37}$$

Para $z > z_2$ la función de onda está dada por la ecuación (T7.23),

$$\psi(z) = \frac{A}{2\sqrt{|p|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{z_2}^{z} |p|\, dz\right], \tag{VII.38}$$

$$|p| = \sqrt{2m\,(mgz - E)}. \tag{VII.39}$$

Resulta así:

$$\psi_n(z) = \frac{A_n}{2\left[2m\,(mgz - E_n)\right]^{1/4}} \exp\left[-\frac{2}{3g\hbar}\sqrt{\frac{2}{m}}\,(mgz - E_n)^{3/2}\right]. \tag{VII.40}$$

VII.6 Aplique el método WKB para determinar la energía de los estados estacionarios de partículas que se mueven dentro de una caja de paredes impenetrables. Analice los resultados y compárelos con los exactos.

La regla de cuantización para el caso unidimensional es (T7.28)

$$\oint p dx = 2\pi\hbar(n + \tfrac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{VII.41}$$

Aplicada al pozo cuadrado infinito de ancho a y p constante se obtiene $\oint p dx = 2ap$, o sea

$$E_n^{\mathrm{WKB}} = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n + \tfrac{1}{2}\right)^2. \tag{VII.42}$$

La solución exacta está dada por la ecuación (T3.28), y difiere de la expresión anterior en que debe hacerse la sustitución $n + \frac{1}{2} \to n + 1$, por lo que el error cometido por la aproximación WKB es

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{n + \frac{3}{4}}{(n+1)^2} \underset{n\longrightarrow\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{n}. \tag{VII.43}$$

Es igualmente simple tratar el problema tridimensional, pues en este caso la regla de cuantización está dada por la ecuación (1) del problema ilustrativo 7.2 del texto,

$$\oint p_i dx_i = 2\pi\hbar\left(n + \frac{c}{4} + \frac{r}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{VII.44}$$

donde c es el número de veces que el contorno de integración cruza la superficie cáustica[2] y r es el número de veces que este contorno toca la pared. Tomando la dirección x y denotando con C el contorno de integración se obtiene

$$\oint_C p_x dx = 2\int_0^{a_1} p_x dx = 2\sqrt{2mE}\,a_1.$$

Como $c = 0$ y $r = 2$ en este caso, queda

$$\sqrt{2mE}\,a_1 = \pi\hbar(n_1 + 1). \tag{VII.45}$$

[2]Una superficie cáustica es la superficie envolvente de los rayos reflejados o refractados por una superficie curva.

De aquí sigue

$$E_{n_1} = \frac{\pi^2\hbar^2 n_1^2}{2ma_1^2}, \quad n_1 = 1, 2, 3, \ldots \tag{VII.46}$$

Un resultado análogo se obtiene para y y z, y así resulta para la energía total

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a_1^2} + \frac{n_2^2}{a_2^2} + \frac{n_3^2}{a_3^2}\right). \tag{VII.47}$$

VII.2. Problemas adicionales

VII.7 En varias aplicaciones de la física y la ingeniería se utilizan variantes del método WKB para resolver de manera aproximada ecuaciones diferenciales lineales y homogéneas de segundo orden. Desarrolle un procedimiento WKB para construir una solución aproximada de la ecuación diferencial

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - f(x)\phi = 0$$

en el intervalo $x_1 < x < x_2$, en el cual se cumple que $f > 0$.

Una manera simple de proceder consiste en buscar una solución de la forma

$$\phi(x) = e^{\zeta(x)}. \tag{VII.48}$$

Sustituyendo en la ecuación diferencial dada, se obtiene para $\zeta(x)$:

$$\zeta''(x) + \zeta'^2(x) - f(x) = 0. \tag{VII.49}$$

La aproximación WKB consiste en suponer que la función ζ varía lentamente dentro del intervalo de interés, de tal manera que se cumple

$$\left|\zeta''\right| \ll \zeta'^2, \quad x_1 < x < x_2. \tag{VII.50}$$

Si éste es el caso, la ecuación (VII.49) puede aproximarse en $[x_1, x_2]$ por

$$\zeta'^2(x) - f(x) = 0, \quad \Rightarrow \zeta(x) = \pm\int_{x_1}^{x}\sqrt{f(s)}ds. \tag{VII.51}$$

La solución general aproximada resulta entonces

$$\phi(x) = A\exp\left[\int_{x_1}^{x}\sqrt{f(s)}ds\right] + B\exp\left[-\int_{x_1}^{x}\sqrt{f(s)}ds\right]. \tag{VII.52}$$

Si $f(x)$ tomara valores negativos dentro del intervalo de interés, se aplicaría una fórmula similar, pero con exponentes imaginarios, por lo que la solución resultaría oscilatoria.

Para que esta solución sea aplicable, la condición (VII.50) demanda que la función f cumpla a su vez con la condición

$$\left|f'\right| \ll 2f^{3/2}, \quad x_1 < x < x_2. \tag{VII.53}$$

Este es el significado preciso de la demanda de que la función f varíe lentamente dentro del intervalo de interés.

VII.8 Utilice el método WKB para determinar el espectro de los estados estacionarios generados por el potencial $V(x) = gx^4$, con $g > 0$.

Para este potencial los puntos clásicos de retorno son $\pm x_0$, $x_0 = (E/g)^{1/4}$, y una aplicación de la ecuación (VII.41) da

$$\oint p dx = \sqrt{2m} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{E - gx^4} dx = 2\pi\hbar(n + \tfrac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad \text{(VII.54)}$$

Con el cambio de variable $z = (g/E)^{1/4}x$, se obtiene

$$\left(\frac{4m^2E^3}{g}\right)^{1/4} \int_{-1}^{1} \sqrt{1 - z^4} dz = 2\pi\hbar(n + \tfrac{1}{2}),$$

o bien, despejando,

$$E_n = \left(\frac{2\pi^2\hbar^2 g^{1/2}}{\gamma^2 m}\right)^{2/3} (n + \tfrac{1}{2})^{4/3} = E_0(2n + 1)^{4/3}, \qquad \text{(VII.55)}$$

donde $\gamma = \int_{-1}^{1} \sqrt{1 - z^4} dz = 1.394\ldots$

Para un potencial de la forma $V(x) = gx^r$, con $g > 0$, el mismo procedimiento arroja el resultado

$$E_n = \left(\frac{\sqrt{2m} g^{1/r}}{\gamma_r} J_n\right)^{2r/(r+2)}, \qquad \text{(VII.56)}$$

donde $\gamma_r = \int_{-1}^{1} \sqrt{1 - z^r} dz$, $J_n = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2})$. Vemos que en el límite $r \to \infty$ (que puede tomarse como similar al caso del pozo cuadrado infinito) los valores propios de la energía crecen con el número cuántico n en la forma $\lim_{r\to\infty}(n+\frac{1}{2})^{2r/(r+2)} = (n + \frac{1}{2})^2 \to n^2$. El crecimiento cuadrático característico del espectro del pozo cuadrado infinito aparece así como el más rápido que podemos esperar, al menos para potenciales monótonos. En el problema VII.12 se estudia esta propiedad con mayor detalle.

VII.9 Encuentre una expresión para el número de niveles discretos de energía que puede contener un potencial atractivo dado $V(x)$.

El momento máximo que puede tener una partícula que se mueve en un potencial atractivo $V(x) < 0$ es $\sqrt{-2mV(x)}$; el número de estados que puede contener el elemento de volumen $dx\,dp$ del espacio fase es igual a $dx\,dp/h^3$. El número total N de niveles discretos de energía que caben en el pozo que puede estimarse con estas consideraciones es

$$N = \frac{\sqrt{2m}}{h} \int \sqrt{-V(x)}\, dx, \qquad \text{(VII.57)}$$

en donde la integración debe realizarse sobre todos los valores de x para los cuales $V(x) < 0$.

[3]Como se explica en la sección 5.2 del texto (véase en particular la expresión para dn inmediatamente después de la ecuación (T5.18)), las reglas de cuantización equivalen a dividir el espacio fase en volúmenes elementales h^3, cada uno de los cuales contiene un posible estado cuántico. Por lo tanto, en el volumen del espacio fase $d^3x d^3p$ caben $d^3n = d^3x d^3p/h^3$ estados. Arriba se usó la versión unidimensional de esta regla.

VII.10 Calcule el coeficiente de transmisión para una partícula con energía $E < V_0$ que cruza la barrera de potencial de Hylleraas $V(x) = V_0 \cosh^{-2}(x/a)$, $V_0 > 0$.

Para $E < V_0$ los puntos clásicos de retorno están determinados por la condición

$$E - \frac{V_0}{\cosh^2(x/a)} = 0. \tag{VII.58}$$

El coeficiente de transmisión está dado por la ecuación (VII.1), cuya aplicación requiere del cálculo de la integral

$$I = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m\left(\frac{V_0}{\cosh^2(x/a)} - E\right)}\, dx. \tag{VII.59}$$

Para realizar la integración podemos recurrir al siguiente procedimiento práctico. Derivamos la expresión (VII.59) respecto del parámetro E y obtenemos[4]

$$\frac{dI}{dE} = -m \int_{x_1}^{x_2} \left[2m\left(\frac{V_0}{\cosh^2(x/a)} - E\right)\right]^{-1/2} dx, \tag{VII.60}$$

expresión que con el cambio de variable $y = \operatorname{senh}(x/a)$ se transforma en

$$\frac{dI}{dE} = -ma \int_{x_1}^{x_2} \frac{dy}{\sqrt{2m(V_0 - E - Ey^2)}} = -\frac{ma\pi}{\sqrt{2mE}}. \tag{VII.61}$$

Integrando este resultado se obtiene para I:

$$I = -\pi a\sqrt{2mE} + C, \tag{VII.62}$$

con C una constante que determinamos considerando que para $E = V_0$ debe tenerse $I = 0$, pues $x_1 = x_2$. Esto da

$$C = \pi a\sqrt{2mV_0} \tag{VII.63}$$

y resulta finalmente

$$I = -\pi a\sqrt{2mE} + \pi a\sqrt{2mV_0}. \tag{VII.64}$$

El coeficiente de transmisión para $E < V_0$ se obtiene usando (T7.41) o (VII.3) y resulta

$$T = \exp\left[-\frac{2\pi}{\hbar}\sqrt{2mV_0a^2}\left(1 - \sqrt{\frac{E}{V_0}}\right)\right]. \tag{VII.65}$$

Vemos que en este caso hay absorción de partículas en el interior de la barrera, fenómeno que queda descrito en términos de una onda evanescente.

VII.11 Una pelota de masa $M = 1$ kg rueda despacio sobre una plataforma horizontal, sobre la que se halla una saliente de sección sinusoidal de 1m de largo y 0.1m de alto. La mecánica clásica predice que la pelota será detenida por la saliente, por falta de energía para remontarla. Podría aducirse que un tratamiento cuántico tal vez modificara este resultado, debido al efecto túnel. Evalúe la probabilidad de que tal cosa ocurra y dictamine sobre la controversia. *Observación*: puede despreciar la energía cinética de la pelota.

[4]Los límites de integración dependen en el presente caso del parámetro; sin embargo, por tratarse de los puntos de retorno, esta dependencia no genera ninguna contribución adicional. En otras palabras, podemos tratar a x_1 y x_2 como fijos.

El coeficiente de transmisión está dado por la ecuación (VII.3),

$$T = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2M\left(V(x)-E\right)}\,dx\right], \tag{VII.66}$$

donde x_1, x_2 son los puntos inicial y final del obstáculo, con $x_2 - x_1 = 1\text{m}$. En la región $x_1 < x < x_2$ la energía potencial está dada por

$$V(x) = Mgd\,\text{sen}\,\frac{\pi(x-x_1)}{x_2-x_1}, \tag{VII.67}$$

en donde d representa la altura de la saliente. Despreciando la energía E del movimiento de translación de la pelota, en una primera aproximación podemos escribir

$$\begin{aligned} T &= \exp\left[-\frac{2M\sqrt{2gd}}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{\text{sen}\,\frac{\pi(x-x_1)}{x_2-x_1}}\,dx\right] \\ &= \exp\left[-\frac{2M\sqrt{2gd}\,(x_2-x_1)}{\pi\hbar}\int_0^{\pi}\sqrt{\text{sen}\,x}\,dx\right]. \end{aligned} \tag{VII.68}$$

Usando la fórmula

$$\int_0^{\pi}\sqrt{\text{sen}\,x}\,dx = \frac{8\pi^{3/2}}{\sqrt{2}\Gamma^2\left(1/4\right)}, \tag{VII.69}$$

se obtiene

$$T = \exp\left[-\frac{16M\sqrt{\pi gd}\,(x_2-x_1)}{\Gamma^2\left(1/4\right)\hbar}\right]. \tag{VII.70}$$

Sustituyendo los valores numéricos apropiados se obtiene

$$T \simeq \exp\left(-2.03\times 10^{34}\right). \tag{VII.71}$$

La probabilidad de que la pelota atraviese la saliente por efecto túnel resulta ridículamente baja. En palabras llanas, el fenómeno simplemente no ocurre y la física clásica mantiene su vigencia.

* **VII.12** Utilice el método WKB para demostrar que para problemas unidimensionales con potenciales $V(x)$ que crecen monótonamente con $|x|$, $V(x) \underset{|x|\to\infty}{\longrightarrow} \infty$, la energía de los estados ligados cumple con la condición

$$E_n - V(0) \leq (A+Bn)^2.$$

Determine los parámetros A y B.

Escribimos la condición de cuantización WKB para los problemas unidimensionales en la forma

$$\int_{x'}^{x''}\sqrt{\varepsilon_n - U(x)}dx = \pi\left(n+\tfrac{1}{2}\right), \tag{VII.72}$$

donde hemos puesto $\varepsilon_n = 2mE_n/\hbar^2$, $U = 2mV/\hbar^2$, y x', x'' son los puntos clásicos de retorno. Consideremos la expresión[5]

$$\int_{x'(v)}^{x''(v)}\sqrt{\varepsilon(v) - U(x)}dx = \pi\left(v+\tfrac{1}{2}\right) \tag{VII.73}$$

[5]Mayores detalles pueden verse en Galindo y Pascual (1989), p. 348.

para una variable real $v \geq 1/2$. Derivando respecto de v se obtiene

$$\frac{d\varepsilon(v)}{dv}\int_{x'(v)}^{x''(v)}\frac{dx}{\sqrt{\varepsilon(v)-U(x)}} = 2\pi. \tag{VII.74}$$

No aparece ninguna contribución debida a los límites de integración que dependen de v, debido una vez más a que el subradical se anula en ellos. Como por hipótesis el potencial crece monótonamente con x, se cumple que $\varepsilon(v)-U(x) \leq \varepsilon(v)-U(0)$, lo que permite escribir, a partir de la última expresión,

$$\frac{d\varepsilon(v)}{dv}\frac{x''(v)-x'(v)}{\sqrt{\varepsilon(v)-U(0)}} \leq 2\pi, \tag{VII.75}$$

o bien,

$$\frac{d\varepsilon(v)}{\sqrt{\varepsilon(v)-U(0)}} \leq 2\pi\frac{dv}{x''(v)-x'(v)}. \tag{VII.76}$$

La integral de esta expresión da

$$\sqrt{\varepsilon(v)-U(0)}-\sqrt{\varepsilon(0)-U(0)} \leq \pi\int_0^v \frac{dv}{x''(v)-x'(v)} \leq \frac{\pi v}{x''(0)-x'(0)}. \tag{VII.77}$$

De aquí es inmediato que (con $a_0 = x''(0)-x'(0)$)

$$E_n - V(0) \leq \left(\sqrt{E_0-V(0)}+\frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m}a_0}n\right)^2, \tag{VII.78}$$

que es el resultado solicitado, con

$$A = \sqrt{E_0-V(0)}, \quad B = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m}a_0}. \tag{VII.79}$$

En particular, para $n \gg 1$ se obtiene la expresión asintótica

$$E_n \leq \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma_0^2}, \quad n\to\infty, \tag{VII.80}$$

que muestra que el espectro del potencial cuadrado infinito crece tan rápido como es posible. Esto se debe a que en este caso $x''(n)-x'(n)$ es realmente una constante independiente de n.

* **VII.13** Más adelante se van a estudiar problemas en varias dimensiones; como preparación es útil resolver directamente el siguiente problema tridimensional. Una partícula de masa M se encuentra confinada en el interior de un cilindro de radio a y altura ζ; el potencial es infinito en la región externa al cilindro, pero nulo en el interior. Determine las funciones propias y los valores propios del hamiltoniano.

Colocaremos el cilindro con el centro de su cara inferior en el origen de coordenadas y su eje sobre el eje vertical Oz. Por la geometría del problema, conviene expresar la ecuación de Schrödinger en coordenadas cilíndricas, por lo que, con $r = \sqrt{x^2+y^2}$ y llamando φ al ángulo azimutal, escribimos

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right] = E\psi, \tag{VII.81}$$

o bien, con $k^2 = 2ME/\hbar^2$,

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + k^2\psi = 0. \tag{VII.82}$$

Esta es una ecuación diferencial en derivadas parciales complicada, pero que admite soluciones separables en cada una de las tres coordenadas r, z y φ. En efecto, escribiendo

$$\psi(r, z, \varphi) = R(r)Z(z)\Phi(\varphi), \tag{VII.83}$$

sustituyendo y dividiendo entre $RZ\Phi$ se obtiene

$$\frac{1}{rR}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = -k^2. \tag{VII.84}$$

Esta ecuación es la suma de tres términos, cada uno de los cuales depende de una (y sólo una) de las tres variables independientes, lo que permite la separación. Entre otras posibilidades, podemos escribir como primer paso

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + k^2 = \lambda^2, \tag{VII.85}$$

lo que reduce la ecuación (VII.84) a

$$\frac{r}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = -\lambda^2 r^2, \tag{VII.86}$$

resultado que a su vez se puede separar en la forma

$$\frac{r}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \lambda^2 r^2 = m^2, \tag{VII.87}$$

$$\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = -m^2. \tag{VII.88}$$

El problema ha sido reducido así a la solución de tres ecuaciones diferenciales totales, las que resolvemos a continuación.

La ecuación angular es

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} + m^2\Phi = 0 \tag{VII.89}$$

y su solución normalizada a la unidad puede escribirse

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-im\varphi}, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots \tag{VII.90}$$

Puesto que se acepta que m puede tomar valores positivos o negativos, no es necesario considerar la solución general (la que se construye como superposición de las funciones propias). La condición sobre los valores permitidos para la constante m viene del requisito de unicidad de la solución angular, pues para cualquier otro valor de m la transformación $\varphi \to \varphi + 2\pi$ (frente a la que la solución debe permanecer invariante) conduciría a un valor diferente de la función.

La ecuación para Z es, de (VII.85),

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + \left(k^2 - \lambda^2\right) Z = 0, \tag{VII.91}$$

y su solución general es

$$Z(z) = Z_1 e^{i\left(k^2-\lambda^2\right)^{1/2} z} + Z_2 e^{-i\left(k^2-\lambda^2\right)^{1/2} z}.$$

Las condiciones de frontera demandan que $Z(0) = Z(\zeta) = 0$; de la primera sigue que $Z_1 + Z_2 = 0$, lo que da

$$Z(z) = Z_0 \operatorname{sen}\left(k^2 - \lambda^2\right)^{1/2} z. \tag{VII.92}$$

De la segunda condición resulta ahora

$$\left(k^2 - \lambda^2\right)^{1/2} \zeta = \pi l, \quad l = 1, 2, 3, \ldots \tag{VII.93}$$

y la solución Z toma la forma, una vez normalizada a la unidad,

$$Z(z) = \sqrt{\frac{2}{\zeta}} \operatorname{sen} \frac{\pi l}{\zeta} z. \tag{VII.94}$$

Finalmente prestamos atención a la función radial $R(r)$, que es solución de la ecuación

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \left(\lambda^2 - \frac{m^2}{r^2}\right) R = 0. \tag{VII.95}$$

En términos de la variable adimensional $\rho = \lambda r$, ésta se reduce a una ecuación de Bessel,

$$\rho^2 R'' + \rho R' + \left(\rho^2 - m^2\right) R = 0, \tag{VII.96}$$

por lo que sus soluciones son

$$R(\rho) = C_m J_m(\lambda r), \tag{VII.97}$$

con C_m la constante de normalización y J_m la función de Bessel de orden m. Las otras soluciones linealmente independientes se expresarían en términos de las funciones $N_m(\lambda r)$ de Neumann, que no son finitas en el origen y deben descartarse. La condición de frontera $R(\lambda a) = 0$ ahora demanda que

$$J_m(\lambda a) = 0, \tag{VII.98}$$

o sea que λ está restringida al conjunto discreto de valores λ_s para los cuales $\lambda_s a$ es una raíz de la función de Bessel $J_m(\lambda a)$; llamando ρ_{ms} a estas raíces, de $\lambda_{ms} a = \rho_{ms}$, la ecuación (VII.93) y $k^2 = 2ME/\hbar^2$ sigue

$$E_{mls} = \frac{\hbar^2}{2M}\left(\lambda_{ms}^2 + \frac{\pi^2 l^2}{\zeta^2}\right) = \frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left(\rho_{ms}^2 + \pi^2 l^2 \frac{a^2}{\zeta^2}\right). \tag{VII.99}$$

Por ejemplo, el estado base corresponde a $m = 0$, $l = 1$ y la primera raíz de $J_0(\rho)$, que ocurre para $\rho = 2.405\ldots$, lo que da para la energía del estado fundamental

$$E_{011} = \frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left((2.405)^2 + \pi^2 \frac{a^2}{\zeta^2}\right). \tag{VII.100}$$

Las funciones propias son

$$\psi_{mls}(r, z, \varphi) = C_m \sqrt{\frac{1}{\pi\zeta}} J_m(\lambda_{ms} r) \operatorname{sen}\left(\frac{\pi l}{\zeta} z\right) e^{-im\varphi}. \tag{VII.101}$$

Se deja al lector la determinación de la constante de normalización C_m.

VII.14 Una partícula con energía $E > 0$ es atrapada en un estado de momento angular diferente de cero por un pozo esférico rectangular de profundidad V_0 y radio a. Use el método WKB para estimar la vida media del estado, suponiendo que la contribución del momento angular dentro del pozo puede ignorarse.

En los capítulos 12 y 13 del texto se estudia la manera de reducir el problema tridimensional con simetría esférica a un problema equivalente unidimensional para la función radial, reducción que, *mutatis mutandis*, es análoga a la que ocurre en la versión clásica del problema. En ambos casos el problema unidimensional equivalente está caracterizado por un potencial efectivo dado por la suma del potencial central externo $V(r)$ y un término que tiene su origen en el momento angular (orbital) del sistema, como se describe en la ecuación (T13.24), llamado potencial centrífugo; específicamente,

$$V_{\text{ef}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2} \tag{VII.102}$$

(una situación análoga ocurre en la ecuación (VII.95) arriba). La cantidad $\hbar^2 l(l+1)$ es la forma que toman los valores propios del cuadrado del momento angular orbital en la mecánica cuántica. De acuerdo con el enunciado del problema, en el interior del pozo debemos tomar $V_{\text{ef}}(r)$ como el potencial activo, aunque, como se propone que es posible despreciar el término cinético, se reduce a $V(r)$. Fuera del pozo, donde $V(r) = 0$, el potencial es $\hbar^2 l(l+1)/2m_0 r^2$ (¡no cero!).

Usamos el potencial efectivo para obtener el coeficiente de transmisión de manera similar a la usada para derivar la ecuación (T7.41); se obtiene

$$T = \left(\frac{E}{E+V_0}\right)^{1/2} \exp\left\{-2\int_a^{r_1}\left[\frac{l(l+1)}{2m_0 r^2} - \frac{2m_0 E}{\hbar^2}\right]^{1/2} dr\right\}, \tag{VII.103}$$

donde r_1 es el punto de retorno clásico, es decir, el valor de r para el cual el subradical se anula:

$$r_1 = \frac{\hbar}{2m_0}\sqrt{\frac{l(l+1)}{E}}. \tag{VII.104}$$

La integral requerida es, con $x = r/r_1$,

$$\begin{aligned} I &= \sqrt{l(l+1)}\int_{a/r_1}^{1} \frac{\sqrt{1-x^2}}{x} dx \\ &= \sqrt{l(l+1)}\left\{\ln\frac{1+\sqrt{1-\beta^2}}{\beta} - \sqrt{1-\beta^2}\right\}, \quad \beta = a/r_1. \end{aligned} \tag{VII.105}$$

De aquí en adelante consideraremos por simplicidad sólo el caso $\beta \ll 1$, para el cual aproximaremos en la forma

$$I \simeq \sqrt{l(l+1)}\ln\frac{2}{\beta}. \tag{VII.106}$$

La relación entre la vida media τ y el coeficiente de transmisión, tomado como probabilidad de escape, está dada por la ecuación (T6.45), es decir,

$$\frac{1}{\tau} = \frac{v}{2a}T, \tag{VII.107}$$

donde el factor $v/2a$ es el número medio de veces que la partícula choca contra la pared de la barrera por unidad de tiempo. Como $v/2a = p/2m_0a = \sqrt{2m_0(E+V_0)}/2m_0a$, se obtiene

$$\tau = \left(\frac{2m_0a^2}{E}\right)^{1/2}\left(\frac{\hbar^2L^2}{2m_0a^2E}\right)^{L}, \quad L = \sqrt{l(l+1)}, \tag{VII.108}$$

lo que muestra que la estabilidad del sistema depende fuertemente de su estado de momento angular.

VII.3. Ejercicios

VII.15 Determine el coeficiente de transmisión para un haz monocromático de electrones de energía 1000 eV e intensidad de 1 mA que incide sobre una barrera rectangular de ancho 10 Å y altura de 200 eV. La altura de la barrera se eleva ahora a 2000 eV; determine el nuevo coeficiente de transmisión y compárelo con el resultado anterior.

VII.16 Determine la probabilidad de que las partículas ligadas a un pozo rectangular finito estén fuera del pozo.

VII.17 Utilice la aproximación WKB para determinar los niveles discretos de energía de una partícula ligada por un potencial de Hylleraas

$$V(x) = -V_0\cosh^{-2}(x/a), \quad V_0 > 0, E < 0.$$

VII.18 Determine los niveles de energía de un oscilador armónico unidimensional mediante el método WKB.

VII.19 Aplique el método WKB para encontrar la relación entre el ancho y la profundidad de un pozo cuadrado unidimensional necesaria para que no exista ningún estado ligado.

VII.20 Utilice el método WKB para determinar el espectro de energía de partículas que se mueven en el potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ V_0\left(\dfrac{a}{x} - \dfrac{x}{a}\right)^2, & x > 0, \end{cases}$$

con $V_0 > 0$, $a > 0$.

VII.21 Utilice la aproximación semiclásica para determinar el valor promedio de la energía cinética de un estado estacionario.

VII.22 Utilice el método WKB para determinar aproximadamente los niveles estacionarios producidos por un potencial de la forma

$$V(x) = Ae^{-2ax} - Be^{-ax}, \qquad A, B, a > 0.$$

VII.23 Determine la forma del espectro de energía dada por la aproximación semiclásica, para partículas ligadas por el potencial $V(x) = ax^{2r}$.

VIII. Operadores y variables dinámicas

VIII.1. Problemas del texto

VIII.1 Demuestre que un operador unitario $\hat{U}$ siempre puede ser expresado en la forma $\hat{U} = \hat{A} + i\hat{B}$, con $\hat{A}$ y $\hat{B}$ operadores hermitianos que conmutan, y que $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan con $\hat{U}$.

Como por hipótesis $\hat{A}$ y $\hat{B}$ son operadores hermitianos, se cumple

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger, \quad \hat{B} = \hat{B}^\dagger$$

y podemos escribir

$$\hat{U} = \hat{A} + i\hat{B}, \quad \hat{U}^\dagger = \hat{A} - i\hat{B}, \tag{VIII.1}$$

de donde

$$\hat{A} = \frac{\hat{U} + \hat{U}^\dagger}{2}, \quad \hat{B} = \frac{\hat{U} - \hat{U}^\dagger}{2i}. \tag{VIII.2}$$

De aquí es inmediato que ambos operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ son hermitianos. Como $\hat{U}$ es unitario, se cumple $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$, y por lo tanto

$$\left(\hat{A} + i\hat{B}\right)\left(\hat{A} - i\hat{B}\right) = \hat{A}^2 + \hat{B}^2 - i\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{1}; \tag{VIII.3}$$

$$\left(\hat{A} - i\hat{B}\right)\left(\hat{A} + i\hat{B}\right) = \hat{A}^2 + \hat{B}^2 + i\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{1}. \tag{VIII.4}$$

De la diferencia de estas igualdades sigue que $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$, o sea que, en efecto, los operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan entre sí. De la suma de estas igualdades se obtiene

$$\hat{A}^2 + \hat{B}^2 = \hat{1}. \tag{VIII.5}$$

Además, $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan ambos con $\hat{U}$ y $\hat{U}^\dagger$; por ejemplo,

$$\left[\hat{A}, \hat{U}\right] = \tfrac{1}{2}\left[\hat{U} + \hat{U}^\dagger, \hat{U}\right] = \tfrac{1}{2}\left[\hat{U}^\dagger, \hat{U}\right] = \tfrac{1}{2}\left[\hat{U}^\dagger\hat{U} - \hat{U}\hat{U}^\dagger\right] = 0. \tag{VIII.6}$$

Para pasar a la segunda igualdad se tomó en cuenta que todo operador conmuta consigo mismo.

Puesto que los operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan entre sí y con $\hat{U}$, existen eigenvectores comunes a estos tres operadores.[1] Esta propiedad es evidente de las ecuaciones (VIII.1), de las que sigue que la relación entre los correspondientes valores propios es

$$U = A + iB, \tag{VIII.7}$$

con A y B números reales. Más aún, según (VIII.5) debe cumplirse que

$$A^2 + B^2 = 1. \tag{VIII.8}$$

Esta pareja de expresiones se cumple automáticamente si se escribe $U = e^{iC}$, con C real y $A = \cos C$, $B = \operatorname{sen} C$, lo que a su vez sugiere escribir los operadores unitarios en la forma

$$\hat{U} = e^{i\hat{\Lambda}}, \tag{VIII.9}$$

con $\hat{\Lambda}$ un operador hermitiano; resulta así[2]

$$\hat{A} = \cos\hat{\Lambda}, \quad \hat{B} = \operatorname{sen}\hat{\Lambda}. \tag{VIII.10}$$

VIII.2 Demuestre que si $\hat{K}$ es un operador hermitiano, el operador $\hat{U}$ definido con las siguientes expresiones es unitario:

a) $\hat{U} = (1 + i\hat{K})/(1 - i\hat{K})$;

b) $\hat{U} = e^{i\hat{K}}$.

a) De la definición de $\hat{U}$ y la hermiticidad de $\hat{K}$ sigue que

$$\hat{U}^\dagger = \frac{1 - i\hat{K}}{1 + i\hat{K}} = U^{-1}. \tag{VIII.11}$$

Ésta es la propiedad que define a un operador unitario.

b) De forma completamente similar, cuando $\hat{U} = e^{i\hat{K}}$ con $\hat{K}$ hermitiana, se cumple que $\hat{U}^\dagger = e^{-i\hat{K}} = U^{-1}$. Como un operador conmuta con cualquier potencia de sí mismo, sigue que $\hat{U}\hat{U}^\dagger = e^{i\hat{K}}e^{-i\hat{K}} = 1$, y, análogamente, que $\hat{U}^\dagger\hat{U} = 1$.

VIII.3 Demuestre que los operadores $\hat{A} = \frac{1}{2}(\hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F})$ y $\hat{B} = i\frac{1}{2}(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})$ son hermitianos si $\hat{F}$ y $\hat{G}$ lo son.

Como $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$ y $\hat{G} = \hat{G}^\dagger$, podemos escribir

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \tfrac{1}{2}\left(\hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F}\right) = \tfrac{1}{2}\left(\hat{F}^\dagger\hat{G}^\dagger + \hat{G}^\dagger\hat{F}^\dagger\right)\\ &= \tfrac{1}{2}\left(\hat{G}^\dagger\hat{F}^\dagger + \hat{F}^\dagger\hat{G}^\dagger\right) = \tfrac{1}{2}\left(\left(\hat{F}\hat{G}\right)^\dagger + \left(\hat{G}\hat{F}\right)^\dagger\right) = \hat{A}^\dagger,\end{aligned}$$

donde hemos utilizado el hecho de que $\left(\hat{F}\hat{G}\right)^\dagger = \hat{G}^\dagger\hat{F}^\dagger$. Esto verifica que $\hat{A}$ es hermitiano.

[1] Esta propiedad se demuestra en la sección 8.5 del texto y se repasa en el problema VIII.13.
[2] Véase el siguiente problema; mayores detalles pueden verse en la sección 10.5 del texto.

De forma análoga se tiene que

$$\begin{aligned}\hat{B} &= \frac{i}{2}\left(\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F}\right)=\frac{i}{2}\left(\hat{F}^{\dagger}\hat{G}^{\dagger}-\hat{G}^{\dagger}\hat{F}^{\dagger}\right)\\ &= \frac{-i}{2}\left(\hat{G}^{\dagger}\hat{F}^{\dagger}-\hat{F}^{\dagger}\hat{G}^{\dagger}\right)=\frac{i^{*}}{2}\left((\hat{F}\hat{G})^{\dagger}-(\hat{G}\hat{F})^{\dagger}\right)=\hat{B}^{\dagger},\end{aligned}$$

que muestra que también $\hat{B}$ es hermitiano. Estos resultados, aunque simples, son muy importantes, pues dan las reglas para construir operadores hermitianos a partir de los productos de dos operadores hermitianos que no conmutan.

VIII.4 Demuestre que el hamiltoniano $\hat{H}=\hat{p}^2/2m+V(x)$ es hermitiano si el potencial es real. ¿Qué condiciones de integrabilidad deben satisfacer las eigenfunciones de $\hat{H}$ para que este resultado sea cierto?

Partimos de la condición de hermiticidad de un operador (ecuación (T8.19)), que puede escribirse en cualquiera de las formas equivalentes:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\hat{F}\varphi dx=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi\hat{F}^{*}\psi^{*}dx=\int_{-\infty}^{\infty}\left(\hat{F}\psi\right)^{*}\varphi dx=\left(\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^{*}\hat{F}\psi dx\right)^{*}. \tag{VIII.12}$$

Incidentalmente, observamos que la igualdad de la primera y la última expresión en (VIII.12) se escribe, en notación de Dirac, en la forma (con $\psi^{*}\rightarrow\langle m|$, $\varphi\rightarrow|n\rangle$),

$$\langle m|\,\hat{F}\,|n\rangle=\left(\langle n|\,\hat{F}\,|m\rangle\right)^{*} \tag{VIII.13}$$

y establece que la matriz que representa a un operador hermitiano es hermitiana, $F_{mn}=F_{nm}^{*}=\left(F^{T*}\right)_{mn}$, o $\hat{F}=\hat{F}^{T*}=\hat{F}^{\dagger}$ (cf. (T8.24)). Retornando al problema escribimos, usando el hamiltoniano dado,

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\hat{H}\varphi dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\frac{\hat{p}^{2}}{2m}\varphi dx+\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}V\left(x\right)\varphi dx. \tag{VIII.14}$$

Como

$$\hat{p}^{2}=(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^{2}=(\hat{p}^{*})^{2}=-\hbar^{2}\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}, \tag{VIII.15}$$

se tiene

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\hat{p}^{2}\varphi dx=-\hbar^{2}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\frac{d^{2}\varphi}{dx^{2}}dx. \tag{VIII.16}$$

Integrando por partes,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\frac{d^{2}\varphi}{dx^{2}}dx &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d}{dx}\left(\psi^{*}\frac{d\varphi}{dx}\right)dx-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\psi^{*}}{dx}\frac{d\varphi}{dx}dx\\ &= \psi^{*}\frac{d\varphi}{dx}\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi^{*}}{dx}\varphi\right)dx+\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^{2}\psi^{*}}{dx^{2}}\varphi dx\\ &= \psi^{*}\frac{d\varphi}{dx}\Big|_{-\infty}^{\infty}-\frac{d\psi^{*}}{dx}\varphi\Big|_{-\infty}^{\infty}+\int_{-\infty}^{\infty}\varphi\frac{d^{2}\psi^{*}}{dx^{2}}dx.\end{aligned} \tag{VIII.17}$$

Vemos que si las funciones de onda cumplen la condición

$$\psi^{*}\frac{d\varphi}{dx}\Big|_{-\infty}^{\infty}-\frac{d\psi^{*}}{dx}\varphi\Big|_{-\infty}^{\infty}=0, \tag{VIII.18}$$

la ecuación (VIII.17) (multiplicada por $-\hbar^2$) se reduce a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}^2 \varphi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi\, \hat{p}^2 \psi^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi \left(\hat{p}^2\right)^* \psi^* dx \tag{VIII.19}$$

(se usó la ecuación (VIII.15) en el último paso), expresión que muestra que el operador $\hat{p}^2$ cumple con la propiedad (VIII.12), por lo que es hermitiano en este caso.

La condición requerida para lograr el resultado anterior, ecuación (VIII.18), puede reescribirse en forma más fuerte, de manera que garantice que también el operador $\hat{p}$ sea hermitiano. Esto se obtiene si se anula cada uno de los términos en (VIII.18) por separado:

$$\psi^* \frac{d\varphi}{dx}\bigg|_{-\infty}^{\infty} = 0; \quad \frac{d\psi^*}{dx}\varphi\bigg|_{-\infty}^{\infty} = 0. \tag{VIII.20}$$

Esta condición la cumplen, en particular, las funciones que se anulan en el infinito, con derivada acotada ahí. En general, las funciones acotadas de cuadrado integrable cumplen con (VIII.20), por lo que en el espacio definido por estas funciones ambos operadores $\hat{p}$ y $\hat{p}^2$ (y el de energía cinética) son hermitianos.

De forma análoga, para un potencial real se satisface trivialmente la condición de hermiticidad (si existe $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* V(x) \varphi dx$):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* V(x) \varphi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* V^*(x) \varphi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi V^*(x) \psi^* dx \tag{VIII.21}$$

y el operador asociado a él es hermitiano.

Combinando ambos resultados se concluye que el hamiltioniano $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(x)$ con V real es hermitiano si las funciones de onda son de cuadrado integrable, con primera derivada acotada. En todo caso, la condición mínima a cumplir es $\psi^*(\infty)\varphi'(\infty) - \psi^*(-\infty)\varphi'(-\infty) = 0$.

VIII.5 Demuestre directamente las siguientes propiedades del conmutador:

$$[\hat{u}, \hat{v}] = -\,[\hat{v}, \hat{u}]\,,$$

$$[\hat{u} + \hat{v}, \hat{w}] = [\hat{u}, \hat{w}] + [\hat{v}, \hat{w}]\,,$$

$$[\hat{u}\hat{w}, \hat{v}] = \hat{u}\,[\hat{w}, \hat{v}] + [\hat{u}, \hat{v}]\,\hat{w},$$

$$[\hat{u}, [\hat{v}, \hat{w}]] + [\hat{v}, [\hat{w}, \hat{u}]] + [\hat{w}, [\hat{u}, \hat{v}]] = 0.$$

La última es la llamada *identidad de Jacobi*. Reescriba los dos últimos resultados usando la propiedad diferencial del conmutador (véase problema ilustrativo 8.4 del texto).

Las cuatro igualdades son consecuencia directa de la definición del conmutador, como se ve a continuación:

$$[\hat{u}, \hat{v}] = \hat{u}\hat{v} - \hat{v}\hat{u} = -\,(\hat{v}\hat{u} - \hat{u}\hat{v}) = -\,[\hat{v}, \hat{u}]\,, \tag{VIII.22}$$

$$[\hat{u} + \hat{v}, \hat{w}] = \hat{u}\hat{w} + \hat{v}\hat{w} - \hat{w}\hat{u} - \hat{w}\hat{v} = [\hat{u}, \hat{w}] + [\hat{v}, \hat{w}]\,, \tag{VIII.23}$$

$$[\hat{u}\hat{w}, \hat{v}] = \hat{u}\hat{w}\hat{v} - \hat{v}\hat{u}\hat{w} = \hat{u}\hat{w}\hat{v} - \hat{u}\hat{v}\hat{w} + \hat{u}\hat{v}\hat{w} - \hat{v}\hat{u}\hat{w} = \hat{u}\,[\hat{w}, \hat{v}] + [\hat{u}, \hat{v}]\,\hat{w}, \tag{VIII.24}$$

$$\begin{aligned}[\hat{u},[\hat{v},\hat{w}]] &= [\hat{u},\hat{v}\hat{w}]-[\hat{u},\hat{w}\hat{v}] = [\hat{u},\hat{v}]\,\hat{w}+\hat{v}\,[\hat{u},\hat{w}]-[\hat{u},\hat{w}]\,\hat{v}-\hat{w}\,[\hat{u},\hat{v}] \\ &= [[\hat{u},\hat{v}]\,,\hat{w}]+[\hat{v},[\hat{u},\hat{w}]]\,. \end{aligned} \tag{VIII.25}$$

Este último resultado es equivalente a

$$[\hat{u},[\hat{v},\hat{w}]]+[\hat{v},[\hat{w},\hat{u}]]+[\hat{w},[\hat{u},\hat{v}]]=0. \tag{VIII.26}$$

Por otra parte, si D es el operador de diferenciación, se tiene

$$D\,(uw)=uDw+(Du)\,w. \tag{VIII.27}$$

Comparando con (VIII.24), reescrita en la forma

$$[\hat{v},\hat{u}\hat{w}]=\hat{u}\,[\hat{v},\hat{w}]+[\hat{v},\hat{u}]\,\hat{w}, \tag{VIII.28}$$

se observa que el operador $[\hat{v},.]$ tiene algunas propiedades algebraicas formalmente similares a las del operador de derivación. Una relación análoga se puede establecer de inmediato para la identidad de Jacobi. En ocasiones la analogía se lleva más lejos, pero debe procederse con cuidado, pues, por ejemplo, tiene sentido directo aplicarla a la ecuación (VIII.23), pero no a la (VIII.22).

Como un ejemplo adicional de esta similitud se tiene el caso de dos operadores $\hat{u}$ y $\hat{v}$ que conmutan ambos con su conmutador $[\hat{u},\hat{v}]$. Esto ocurre, en particular, cuando $\hat{u}$ y $\hat{v}$ son una pareja de operadores canónicos conjugados, pues entonces, por definición, se tiene $[\hat{u},\hat{v}]=i\hbar$ y todo operador conmuta con una constante. Es inmediato probar que en estas condiciones se cumple que

$$[\hat{u},\hat{v}^n]=n\hat{v}^{n-1}\,[\hat{u},\hat{v}]\,, \tag{VIII.29}$$

$$[\hat{u}^n,\hat{v}]=n\hat{u}^{n-1}\,[\hat{u},\hat{v}]\,. \tag{VIII.30}$$

Estas ecuaciones pueden escribirse en la forma $D\hat{w}^n=n\hat{w}^{n-1}D\hat{w}$, con $\hat{w}=\hat{v}$, $\hat{u}$, sucesivamente.

VIII.6 Demuestre que si $[\hat{F},\hat{G}]=0$, entonces $[\hat{F}^n,\hat{G}^m]=0$ y $[f(\hat{F},\hat{G}),g(\hat{F},\hat{G})]=0$ para funciones f y g que se pueden desarrollar en serie de potencias.

Los resultados solicitados deben ser intuitivamente claros, pues si los dos operadores en cuestión conmutan entre sí, al operar con sus relaciones se les puede tratar como si fueran funciones usuales. Para llevar a cabo la demostración de manera más formal partimos del hecho de que si dos operadores $\hat{u}$ y $\hat{v}$ satisfacen la relación

$$[[\hat{u},\hat{v}]\,,\hat{u}]=0, \tag{VIII.31}$$

se cumple que

$$[\hat{u}^n,\hat{v}]=n\hat{u}^{n-1}\,[\hat{u},\hat{v}]\,, \tag{VIII.32}$$

lo cual se demuestra de manera análoga a la empleada para obtener la ecuación (VIII.30).

Es claro que si $[\hat{F},\hat{G}]=0$, entonces se satisface (VIII.31) y podemos escribir

$$\begin{aligned}[\hat{F}^m,\hat{G}] &= m\hat{F}^{m-1}[\hat{F},\hat{G}]=0, \\ [\hat{G}^m,\hat{F}] &= m\hat{G}^{m-1}[\hat{G},\hat{F}]=0. \end{aligned} \tag{VIII.33}$$

Con ayuda de la propiedad (VIII.24) y tomando $\hat{u} = \hat{G}^{m-1}, \hat{v} = \hat{F}^n, \hat{w} = \hat{G}$, podemos escribir

$$\begin{aligned}\left[\hat{F}^n, \hat{G}^m\right] &= \hat{G}^{m-1}\left[\hat{F}^n, \hat{G}\right] + \left[\hat{F}^n, \hat{G}^{m-1}\right]\hat{G} = \left[\hat{F}^n, \hat{G}^{m-1}\right]\hat{G} \\ &= \left[\hat{F}^n, \hat{G}^{m-2}\right]\hat{G}^2 = \cdots = \left[\hat{F}^n, \hat{G}\right]\hat{G}^{m-1} = 0, \qquad \text{(VIII.34)}\end{aligned}$$

que es uno de los resultados solicitados.

Consideremos ahora dos funciones $f(\hat{F}, \hat{G})$ y $g(\hat{F}, \hat{G})$, que pueden desarrollarse en serie de potencias de los operadores $\hat{F}$ y $\hat{G}$ en la forma

$$f(\hat{F}, \hat{G}) = \sum_{n,m} c_{nm}\hat{F}^n\hat{G}^m, \qquad \text{(VIII.35)}$$

$$g(\hat{F}, \hat{G}) = \sum_{n,m} d_{nm}\hat{F}^n\hat{G}^m. \qquad \text{(VIII.36)}$$

No hay problema alguno de ordenamiento en el presente caso porque ambos operadores conmutan. Estos desarrollos permiten escribir

$$\left[f(\hat{F}, \hat{G}), g(\hat{F}, \hat{G})\right] = \sum_{n,m}\sum_{n'm'} c_{nm}d_{n'm'}\left[\hat{F}^n\hat{G}^m\hat{F}^{n'}\hat{G}^{m'} - \hat{F}^{n'}\hat{G}^{m'}\hat{F}^n\hat{G}^m\right] = 0, \qquad \text{(VIII.37)}$$

debido una vez más a que los operadores involucrados y sus potencias conmutan. Esto completa la solución.

VIII.7 Demuestre que si $\hat{F}$ y $\hat{G}$ son dos operadores que conmutan, entonces

$$\left[\hat{F}^{-1}, \hat{G}\right] = \left[\hat{F}, \hat{G}^{-1}\right] = \left[\hat{F}^{-1}, \hat{G}^{-1}\right] = 0.$$

Supondremos naturalmente que los operadores $\hat{F}^{-1}$ y $\hat{G}^{-1}$ existen, y desarrollamos como sigue:

$$\hat{F}\left[\hat{F}^{-1}, \hat{G}\right] = \hat{F}\hat{F}^{-1}\hat{G} - \hat{F}\hat{G}\hat{F}^{-1} = \hat{G} - \hat{G}\hat{F}\hat{F}^{-1} = 0.$$

En el penúltimo paso se tomó en cuenta que $\hat{F}$ y $\hat{G}$ conmutan. De aquí sigue que para $\hat{F} \neq 0$,

$$\left[\hat{F}^{-1}, \hat{G}\right] = 0. \qquad \text{(VIII.38)}$$

De forma análoga podemos escribir

$$\left[\hat{F}, \hat{G}^{-1}\right]\hat{G} = \hat{F}\hat{G}^{-1}\hat{G} - \hat{G}^{-1}\hat{F}\hat{G} = \hat{F} - \hat{G}^{-1}\hat{G}\hat{F} = 0,$$

o sea

$$\left[\hat{F}, \hat{G}^{-1}\right] = 0. \qquad \text{(VIII.39)}$$

Finalmente,

$$\hat{F}\left[\hat{F}^{-1}, \hat{G}^{-1}\right] = \hat{F}\hat{F}^{-1}\hat{G}^{-1} - \hat{F}\hat{G}^{-1}\hat{F}^{-1} = \hat{G}^{-1} - \hat{G}^{-1}\hat{F}\hat{F}^{-1} = 0,$$

en donde hemos usado el resultado anterior. Luego se puede escribir

$$\left[\hat{F}^{-1}, \hat{G}^{-1}\right] = 0. \qquad \text{(VIII.40)}$$

VIII.8 Demuestre que si $\hat{F}$ y $\hat{G}$ conmutan con $\hat{H}$, entonces $\left[\hat{F}\hat{G},\hat{H}\right]=0$.

Se tiene por hipótesis que

$$\left[\hat{F},\hat{H}\right]=0,\quad \left[\hat{G},\hat{H}\right]=0.$$

Usando la propiedad (VIII.24) obtenemos

$$\left[\hat{F}\hat{G},\hat{H}\right]=\hat{F}\left[\hat{G},\hat{H}\right]+\left[\hat{F},\hat{H}\right]\hat{G}=0,$$

que es el resultado solicitado.

VIII.9 Calcule los conmutadores $[\hat{x},\hat{H}]$ y $[\hat{p},\hat{H}]$ para hamiltonianos de la forma $\hat{p}^2/2m+\hat{V}$, con $\hat{V}=V(\hat{x})$.

Este problema se resuelve en las páginas 216 y 217 del texto. La técnica usada ahí es sumamente útil y se debe aprender a manejarla con soltura. Como ejemplo adicional combinaremos el procedimiento sugerido con el conmutador $[\hat{x},\hat{p}^2]=2i\hbar\hat{p}$ para escribir

$$\begin{aligned}\left[\hat{x},\hat{p}^4\right] &= \hat{x}\hat{p}^4-\hat{p}^4\hat{x}=\left(\hat{x}\hat{p}^2-\hat{p}^2\hat{x}\right)\hat{p}^2-\hat{p}^2\left(\hat{p}^2\hat{x}-\hat{x}\hat{p}^2\right)\\ &= [\hat{x},\hat{p}^2]\hat{p}^2+\hat{p}^2[\hat{x},\hat{p}^2]=4i\hbar\hat{p}^3=[\hat{x},\hat{p}]\,\frac{d\hat{p}^4}{d\hat{p}},\end{aligned}\qquad\text{(VIII.41)}$$

y así sucesivamente. En la sección 9.4 del texto se estudian en general este tipo de relaciones. Obsérvese que esta expresión permite interpretar el operador $\hat{D}_p\equiv[\hat{x},\cdot]$ como análogo al operador de derivación respecto de $\hat{p}$, como se discute en el problema VIII.5.

El cálculo explícito de $[\hat{p},\hat{H}]$ es el siguiente:

$$\left[\hat{p},\hat{H}\right]=[\hat{p},V]=-i\hbar\left[\frac{\partial}{\partial x},V\right]=-i\hbar\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right).\qquad\text{(VIII.42)}$$

En el primer paso se tomó en cuenta que $\hat{p}$ conmuta con $\hat{p}^2$.

VIII.10 Muestre que para una variable q de espectro continuo, el operador $\hat{F}(q)$ tiene la representación

$$\left\langle q''\left|\hat{F}(q)\right|q'\right\rangle=F(q')\delta(q'-q'').$$

Los casos $\hat{F}=1$ y $\hat{F}=\hat{q}$ son particularmente importantes.

Sea $|q'\rangle$ un vector propio del operador $\hat{F}$, de tal manera que podemos escribir

$$\hat{F}(q)\left|q'\right\rangle=F(q')\left|q'\right\rangle.\qquad\text{(VIII.43)}$$

Multiplicando a la izquierda por $\langle q''|$ se obtiene el resultado solicitado:

$$\left\langle q''\left|\hat{F}(q)\right|q'\right\rangle=\left\langle q''\left|F(q')\right|q'\right\rangle=F(q')\left\langle q''\mid q'\right\rangle=F(q')\delta(q'-q''),\qquad\text{(VIII.44)}$$

donde se tomó en cuenta que la base es ortonormal,

$$\left\langle q''\mid q'\right\rangle=\delta(q'-q'').\qquad\text{(VIII.45)}$$

Una aplicación importante de este resultado se obtiene al considerar la representación de coordenadas de una función $f(\hat{x})$; de (VIII.44) sigue que la matriz que la representa es diagonal, con los elementos diagonales iguales a (sus eigenvalores) $f(x)$.

VIII.11 Compruebe que las expresiones

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1, \quad \sum_n \varphi_n^*(x)\varphi_n(x') = \delta\left(x - x'\right)$$

son equivalentes (de hecho, son dos formas diferentes de la relación de completez).

Partimos de la condición de ortonormalidad (VIII.45) aplicada a la variable continua x —que podría ser, pero no necesariamente es, la de posición—

$$\left\langle x \mid x' \right\rangle = \delta(x - x'), \tag{VIII.46}$$

para escribir, insertando el desarrollo de la unidad en términos de la representación discreta $\mid n\rangle$, $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$,

$$\delta(x - x') = \langle x| \, x' \rangle = \sum_n \langle x \mid n\rangle \left\langle n \mid x' \right\rangle = \sum_n \varphi_n^*(x')\varphi_n(x), \tag{VIII.47}$$

donde se hizo la identificación (ecuaciones (T8.38) y (T8.39))

$$\langle x \mid n\rangle = \varphi_n\left(x\right), \quad \langle n \mid x\rangle = \varphi_n^*\left(x\right). \tag{VIII.48}$$

Esto muestra la equivalencia de ambas expresiones. De hecho, se trata de lo mismo, pero $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$ lo expresa en forma abstracta, mientras que $\sum_n \varphi_n^*(x)$ $\varphi_n(x') = \delta(x - x')$ lo dice en términos de una representación específica.

Como ilustración adicional es conveniente presentar la siguiente variante del cálculo anterior, que hace uso simultáneo de las propiedades de completez (o de cerradura o completitud) para variable discreta

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1 \tag{VIII.49}$$

y para variable continua, la cual se expresa en la forma

$$\int dx \mid x\rangle\langle x \mid = 1. \tag{VIII.50}$$

Escribimos sucesivamente, combinando estas propiedades,

$$\begin{aligned} \sum_n |n\rangle \langle n| = 1 &= \sum_n \int dx \int dx' \mid x\rangle\langle x \mid n\rangle\langle n \mid x'\rangle\langle x' \mid \\ &= \int dx \int dx' \mid x\rangle \left(\sum_n \langle x \mid n\rangle\langle n \mid x'\rangle\right) \langle x' \mid \\ &= \int dx \mid x\rangle\langle x \mid = \int dx \int dx' \mid x\rangle \delta\left(x - x'\right) \langle x' \mid, \end{aligned} \tag{VIII.51}$$

de donde sigue que debe cumplirse que

$$\sum_n \langle x \mid n\rangle\langle n \mid x'\rangle = \delta(x - x'),$$

que es la ecuación (VIII.47). De esta manera vemos que (VIII.49) y (VIII.50) se implican mutuamente cuando se cumple (VIII.47).

VIII.12 Demuestre que $(\langle\varphi \mid \hat{F}) \mid \psi\rangle = \langle\varphi \mid (\hat{F} \mid \psi\rangle)$, por lo que basta con escribir $\langle\varphi \mid \hat{F} \mid \psi\rangle$.

Tomemos la representación propia del operador $\hat{F}$ (que supondremos discreta), en la que $\hat{F}$ se escribe en términos de sus eigenvectores $|n\rangle$ y eigenvalores f_n en la forma

$$\hat{F} = \sum_n f_n |n\rangle \langle n| . \tag{VIII.52}$$

Actuando con $\hat{F}$ sobre un ket $|\psi\rangle$ arbitrario obtenemos

$$\hat{F}|\psi\rangle = \sum_n f_n |n\rangle \langle n \mid \psi\rangle = \sum_n c_n f_n |n\rangle , \quad c_n = \langle n \mid \psi\rangle . \tag{VIII.53}$$

De aquí sigue que

$$\langle\varphi \mid \left(\hat{F} \mid \psi\rangle\right) = \sum_n c_n f_n \langle\varphi \mid n\rangle = \sum_n b_n c_n f_n, \quad b_n = \langle\varphi \mid n\rangle . \tag{VIII.54}$$

De manera análoga se obtiene, usando las definiciones anteriores para los coeficientes, que

$$\langle\varphi|\hat{F} = \sum_n f_n \langle\varphi \mid n\rangle \langle n| = \sum_n f_n b_n \langle n| , \tag{VIII.55}$$

$$\left(\langle\varphi \mid \hat{F}\right) \mid \psi\rangle = \sum_n f_n b_n \langle n \mid \psi\rangle = \sum_n b_n c_n f_n. \tag{VIII.56}$$

Comparando las ecuaciones (VIII.54) y (VIII.56) se comprueba que

$$(\langle\varphi \mid \hat{F}) \mid \psi\rangle = \langle\varphi \mid (\hat{F} \mid \psi\rangle) \equiv \langle\varphi \mid \hat{F} \mid \psi\rangle. \tag{VIII.57}$$

Incidentalmente, es conveniente observar que la ecuación (VIII.53) se puede escribir en la forma alterna

$$\hat{F}|\psi\rangle = \sum_n f_n |\psi_n\rangle , \tag{VIII.58}$$

donde se ha puesto

$$|\psi_n\rangle = c_n |n\rangle = \langle n \mid \psi\rangle |n\rangle . \tag{VIII.59}$$

$|\psi_n\rangle$ es la componente del ket $|\psi\rangle$ arbitrario en la dirección del vector $|n\rangle$ de la base propia de $\hat{F}$.

VIII.13 Demuestre el teorema que concluye con la ecuación (T8.62), empleando la notación de Dirac.

Se trata de demostrar que dos operadores $\hat{F}$ y $\hat{G}$ poseen vectores propios comunes si y sólo si conmutan. Siguiendo el método usado en el texto, proponemos primero que ambos operadores poseen vectores propios comunes, e investigamos lo que esto implica. Sean $\{|\, n\rangle\}$ estos eigenvectores comunes, lo que significa que

$$\hat{F} \mid n\rangle = f_n \mid n\rangle, \quad \hat{G} \mid n\rangle = g_n \mid n\rangle. \tag{VIII.60}$$

De aquí sigue

$$\hat{G}\hat{F} \mid n\rangle = f_n \hat{G} \mid n\rangle = f_n g_n \mid n\rangle, \tag{VIII.61}$$

$$\hat{F}\hat{G} \mid n\rangle = g_n \hat{F} \mid n\rangle = f_n g_n \mid n\rangle. \tag{VIII.62}$$

Restando estas igualdades y multiplicando por $\langle m \mid$ por la izquierda obtenemos

$$\langle m \mid [\hat{F}, \hat{G}] \mid n\rangle = 0, \tag{VIII.63}$$

resultado que dice que todos los elementos de matriz del operador $[\hat{F}, \hat{G}]$ son nulos; luego el operador mismo, es decir, el conmutador de los operadores en cuestión, es nulo:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0. \tag{VIII.64}$$

Ahora debemos mostrar que el resultado es suficiente. Para ello consideramos que valen simultáneamente las ecuaciones

$$\hat{F} \mid n\rangle = f_n \mid n\rangle, \quad [\hat{F}, \hat{G}] = 0, \tag{VIII.65}$$

que establecen que los operadores $\hat{F}$ y $\hat{G}$ conmutan, y que $\mid n\rangle$ es eigenvector de uno de estos operadores, $\hat{F}$ para n arbitraria. Mostraremos que esto implica que el ket $\mid n\rangle$ es vector propio del otro operador, $\hat{G}$. Para ello, consideramos el elemento de matriz

$$\langle m \mid \hat{G}\hat{F} \mid n\rangle = f_n \langle m \mid \hat{G} \mid n\rangle. \tag{VIII.66}$$

Como ambos operadores son hermitianos y conmutan su producto es hermitiano, por lo que podemos escribir, usando (VIII.13) y el hecho de que los eigenvalores f_n son reales,

$$\begin{aligned} \langle m \mid \hat{G}\hat{F} \mid n\rangle &= \left(\langle n \mid \hat{G}\hat{F} \mid m\rangle\right)^* = f_m \left(\langle n \mid \hat{G} \mid m\rangle\right)^* \\ &= f_m \langle m \mid \hat{G} \mid n\rangle. \end{aligned} \tag{VIII.67}$$

Restando (VIII.66) y (VIII.67), queda

$$(f_n - f_m)\, \langle m \mid \hat{G} \mid n\rangle = 0,$$

cuya solución general es

$$\langle m \mid \hat{G} \mid n\rangle = g_n \delta_{nm}, \tag{VIII.68}$$

con los números g_n finitos. Este resultado muestra que el operador $\hat{G}$ es diagonal en esta base, es decir, se encuentra en su propia representación, y el conjunto $\{\mid n\rangle\}$ representa a sus eigenvectores. Luego $\hat{F}$ y $\hat{G}$ poseen eigenvectores comunes y los números g_n son los valores propios de $\hat{G}$: $\hat{G} \mid n\rangle = g_n \mid n\rangle$. Esto sigue directamente de (VIII.68) multiplicando a la izquierda por $\mid m\rangle$, sumando sobre todos los valores del índice y usando (VIII.49):

$$\sum_m \mid m\rangle\langle m \mid \hat{G} \mid n\rangle = \hat{G} \mid n\rangle = \sum_m g_n \delta_{nm} \mid m\rangle = g_n \mid n\rangle. \tag{VIII.69}$$

Cuando hay degeneración siempre se puede usar, en caso de requerirse, el procedimiento de diagonalización de Gramm-Schmidt, por lo que el resultado anterior mantiene su vigencia.

VIII.14 Demuestre que para todo operador hermitiano $\hat{A}$ se cumple que

$$\left\langle n \left| \left(\Delta \hat{A}\right)^2 \right| n \right\rangle = \sum_{n' \neq n} \left| \left\langle n \left| \hat{A} \right| n' \right\rangle \right|^2.$$

La dispersión (en el estado $\mid n\rangle$) de un operador hermitiano $\hat{A}$ arbitrario está dada por la ecuación (T8.60),

$$\left\langle n \mid \left(\Delta\hat{A}\right)^2 \mid n \right\rangle = \left\langle n \mid \hat{A}^2 \mid n \right\rangle - \left\langle n \mid \hat{A} \mid n \right\rangle^2. \tag{VIII.70}$$

Insertando el desarrollo de la unidad en la base $\mid n\rangle$ y usando (VIII.13), podemos escribir

$$\begin{aligned} \left\langle n \mid \hat{A}^2 \mid n \right\rangle &= \left\langle n \mid \hat{A}\hat{A} \mid n \right\rangle = \sum_{n'} \left\langle n \mid \hat{A} \mid n' \right\rangle \left\langle n' \mid \hat{A} \mid n \right\rangle \\ &= \sum_{n'} \left\langle n \mid \hat{A} \mid n' \right\rangle \left\langle n \mid \hat{A} \mid n' \right\rangle^* = \sum_{n'} \left| \left\langle n \mid \hat{A} \mid n' \right\rangle \right|^2. \end{aligned} \tag{VIII.71}$$

De aquí sigue, separando el término que corresponde a $n' = n$,

$$\begin{aligned} \left\langle n \mid \hat{A}^2 \mid n \right\rangle - \left\langle n \mid \hat{A} \mid n \right\rangle^2 &= \sum_{n'} \left| \left\langle n \mid \hat{A} \mid n' \right\rangle \right|^2 - \left\langle n \mid \hat{A} \mid n \right\rangle^2 \\ &= \sum_{n' \neq n} \left| \left\langle n \mid \hat{A} \mid n' \right\rangle \right|^2. \end{aligned} \tag{VIII.72}$$

De (VIII.70) y (VIII.72) sigue el resultado solicitado:

$$\left\langle n \left| \left(\Delta\hat{A}\right)^2 \right| n \right\rangle = \sum_{n' \neq n} \left| \left\langle n \left| \hat{A} \right| n' \right\rangle \right|^2. \tag{VIII.73}$$

VIII.15 Calcule el valor del producto $\left\langle (\Delta\hat{x})^2 \right\rangle \left\langle (\Delta\hat{p})^2 \right\rangle$ para un pozo rectangular unidimensional infinito y muestre que se cumplen las desigualdades de Heisenberg para toda n. ¿Qué pasa cuando $n = 1$ y cuando $n \to \infty$? ¿Cómo cambian $\left\langle (\Delta\hat{x})^2 \right\rangle$ y $\left\langle (\Delta\hat{p})^2 \right\rangle$ conforme n crece? ¿Cuál es la dispersión de x para el correspondiente problema clásico?

Las eigenfunciones y eigenvalores de la energía del pozo rectangular infinito comprendido entre $x = 0$ y $x = a$ están dadas por las ecuaciones (T3.31) y (T3.28), y son

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{\pi n}{a} x, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{VIII.74}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2.$$

La simetría del problema implica que las partículas se distribuyen simétricamente alrededor de la posición media en todos los estados, y, en efecto, se tiene

$$\overline{x_n} = \frac{2}{a} \int_0^a x \operatorname{sen}^2 \frac{\pi n}{a} x dx = \frac{a}{2}. \tag{VIII.75}$$

Por otro lado, del problema III.6 sabemos que

$$\overline{x_n^2} = \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \operatorname{sen}^2 \frac{\pi n}{a} x dx = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right). \tag{VIII.76}$$

Esta fórmula muestra que para evitar resultados sin sentido se debe excluir la solución trivial que corresponde a $n = 0$ (y a $\varphi_0 = 0$). Combinando (VIII.76) con (VIII.75) se obtiene para la dispersión

$$\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle_n = \langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2 = a^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right). \tag{VIII.77}$$

Vemos que la dispersión de la posición varía poco con el valor del número cuántico n, pasando de $0.0326a^2$ para $n = 1$ a $0.0833a^2$ para $n \to \infty$, una razón menor que 1 a 3.

Los cálculos para el momento son más simples, pues por simetría es claro que

$$\langle \hat{p} \rangle_n = 0; \tag{VIII.78}$$

a su vez, de la ecuación de Schrödinger sigue que

$$\langle \hat{p}^2 \rangle_n = 2mE_n = \left(\frac{\pi \hbar n}{a} \right)^2. \tag{VIII.79}$$

Así pues,

$$\left\langle (\Delta \hat{p})^2 \right\rangle_n = \langle \hat{p}^2 \rangle_n - \langle \hat{p} \rangle_n^2 = \left(\frac{\pi \hbar}{a} \right)^2 n^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle_1 \, n^2. \tag{VIII.80}$$

De (VIII.77) y (VIII.80) sigue que

$$\left\langle (\Delta \hat{x})^2 \right\rangle \left\langle (\Delta \hat{p})^2 \right\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{\pi^2 n^2}{3} - 2 \right) \geq \frac{\hbar^2}{4} \tag{VIII.81}$$

para toda n permitida. El menor valor posible de este producto ocurre para $n = 1$, para el que el paréntesis vale $1.289\ldots$, es decir, poco más de la unidad. Para $n \to \infty$ la dispersión de x se estabiliza y tiende a su valor clásico $a^2/12$ (véase el problema III.6), pero la de p crece ilimitadamente, pues la energía crece pero $\langle p \rangle$ se mantiene nula.

Obsérvese que la cota inferior dada por las desigualdades de Heisenberg puede ser considerablemente menor que el valor que realmente adquiere el producto de las dispersiones para altos niveles de excitación. Por ejemplo, en el presente caso este producto vale $\left(\pi^2 \hbar^2/12\right) n^2$, que alcanza valores arbitrariamente grandes.

VIII.16 Mediante un análisis dimensional, determine un valor razonable para el radio característico del átomo de hidrógeno; use este resultado para estimar el orden de magnitud de la energía del estado base del hidrógeno.

El radio del átomo de hidrógeno puede depender sólo de las constantes universales m, e^2 y $\hbar$, aparte de factores numéricos (el factor $4\pi\varepsilon_0$ característico del SI de unidades lo dejamos de lado por el momento). Escribiendo este radio en la forma $r_0 = m^a e^{2b} \hbar^c$, un análisis dimensional da como solución única $a = b = -1$, $c = 2$, por lo que obtenemos (en el SI)

$$r_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{me^2} \simeq 5.3 \times 10^{-11}\,\mathrm{m} \simeq 0.5\text{Å}. \tag{VIII.82}$$

Este valor coincide con el radio del estado base calculado como el valor esperado $\langle 0 | \, r \, | 0 \rangle$, ($|0\rangle$ corresponde al estado base del hidrógeno), lo que debemos considerar como una coincidencia afortunada, pero casual.

Como $\langle p \rangle = 0$, para el estado base (o estados de excitación no muy elevada) podemos escribir las desigualdades de Heisenberg en la forma semicuantitativa

$$r_0^2 \left\langle p^2 \right\rangle \sim \hbar^2,$$

de donde sigue que

$$\left\langle p^2 \right\rangle \sim \frac{\hbar^2}{r_0^2}. \tag{VIII.83}$$

La energía del estado base calculada con estos valores resulta

$$E\left(r_0\right) = \bar{T} + \bar{V} = \frac{\left\langle p^2 \right\rangle}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0} \sim \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}. \tag{VIII.84}$$

Sustituyendo aquí el valor (VIII.82) de r_0 obtenemos como estimación de la energía del estado base del átomo de hidrógeno

$$E\left(r_0\right) = -\frac{me^4}{2\left(4\pi\varepsilon_0\right)^2 \hbar^2} \simeq -13.6 \text{ eV}. \tag{VIII.85}$$

La expresión final resultó la exacta, pero una vez más se trata de una coincidencia afortunada, debida a la cancelación fortuita de errores.

Es posible evitar el uso del método dimensional (que es insensible en su forma elemental a factores puramente numéricos), y darle a la vez un poco más de solidez al cálculo anterior, demandando que la energía del estado base atómico corresponda a un mínimo. En efecto, derivando la ecuación (VIII.84) respecto de r_0, se encuentra que existe un mínimo de la energía que ocurre para

$$r_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{me^2},$$

valor que coincide con el previamente obtenido, ecuación (VIII.82); por lo tanto, la energía mínima coincide con la estimación anterior. Comparando con los resultados que da la teoría de Bohr (ecuaciones (T1.23a) y (T1.23b) con $e = e'$, $n = 1$ y $4\pi\varepsilon_0 \to 1$) se verifica que coinciden; de hecho, la estimación anterior da circunstancialmente los resultados correctos (los que se derivan en la sección 13.3 del texto a partir de la teoría general).

Los resultados son significativos, en cuanto que muestran el papel esencial que juegan las desigualdades de Heisenberg en la determinación del valor mínimo posible de la energía de los sistemas cuánticos.

El valor de r_0 que corresponde a la mínima energía es solución de la ecuación

$$\frac{\partial E}{\partial r_0} = \frac{\partial \bar{T}}{\partial r_0} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial r_0} = -\frac{2}{r_0}\bar{T} - \frac{1}{r_0}\bar{V} = 0,$$

que muestra que este mínimo ocurre cuando

$$2\bar{T} + \bar{V} = 0 \quad \Rightarrow \quad E = \bar{T} + \bar{V} = -\bar{T} = \tfrac{1}{2}\bar{V}. \tag{VIII.86}$$

Estos resultados adelantan algunas de las predicciones del teorema del virial cuántico, como se discute en el problema ilustrativo 9.1 del texto.

VIII.17 Construya la ecuación diferencial que determina los paquetes de mínima dispersión respecto a parejas de las variables $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{H}$. Proponga algún caso de interés y resuélvalo.

Este problema se discute con toda generalidad en la sección 8.6 del texto, donde se demuestra que los estados de mínima dispersión respecto de la pareja de variables $\hat{A}$ y $\hat{B}$ son solución de la ecuación

$$\left(\hat{B}-\bar{B}\right)\psi = i\alpha\left(\hat{A}-\bar{A}\right)\psi, \tag{VIII.87}$$

con

$$\alpha = \frac{\left\langle \hat{C}\right\rangle}{2\left\langle \left(\hat{A}-\bar{A}\right)^2\right\rangle}, \quad \hat{C} = -i\left[\hat{A},\hat{B}\right]. \tag{VIII.88}$$

En el caso particular de la pareja $\hat{x}$, $\hat{p}$ se tiene $\hat{C}=\hbar$; poniendo $\hat{A}=x$, $\hat{B}=-i\hbar\partial/\partial x$, $\left\langle (x-\bar{x})^2\right\rangle = \sigma_x^2$, se obtiene la ecuación diferencial

$$\frac{d\psi}{dx} + \frac{1}{2\sigma_x^2}x\psi - \left(\frac{i\bar{p}}{\hbar}+\frac{\bar{x}}{2\sigma_x^2}\right)\psi = 0. \tag{VIII.89}$$

El caso particular $\bar{x}=\bar{p}=0$ se discute en el texto, donde se demuestra que el paquete de mínima dispersión es una gaussiana centrada en el origen. Para $\bar{x}$ y $\bar{p}$ arbitrarias es fácil verificar que la solución continúa siendo una gaussiana de anchura arbitraria, pero ahora centrada en $\bar{x}$ y propagándose con momento $\bar{p}$:

$$\psi = Ae^{-(x-\bar{x})^2/4\sigma_x^2 + i\bar{p}x/\hbar}. \tag{VIII.90}$$

Para las otras parejas de operadores se puede proceder de manera similar. En concreto, para $\hat{A}=x$, $\hat{B}=\hat{H}$ se tiene $\hat{C} = -i\left[\hat{x},\hat{H}\right] = (\hbar/m)\hat{p}$, y la ecuación (VIII.87) se transforma en

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \left(V - \frac{i\hbar\bar{p}}{2m\sigma_x^2}x\right)\psi = \left(E - \frac{i\hbar\bar{x}\bar{p}}{2m\sigma_x^2}\right)\psi. \tag{VIII.91}$$

De manera análoga, para $\hat{A}=\hat{p}, \hat{B}=\hat{H}$ se tiene $\left\langle \hat{C}\right\rangle = -\hbar\overline{V'}$, y la ecuación diferencial que determina el paquete minimal es

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi + i\frac{\hbar\overline{V'}}{2\sigma_p^2}\hat{p}\psi + V\psi = \left(E + \frac{i\hbar\bar{p}\overline{V'}}{2\sigma_p^2}\right)\psi. \tag{VIII.92}$$

En este caso ψ puede reducirse a una función propia de $\hat{H}$ sólo para eigenfunciones de $\hat{p}$, como es fácil verificar. Esto puede ocurrir sólo para partículas libres.

VIII.18 Muestre que los operadores de proyección $\hat{P}_n = \mid n\rangle\langle n \mid$ son idempotentes, mutuamente ortogonales y satisfacen la relación de completez $\sum_n \hat{P}_n = 1$.

Antes de entrar al cálculo solicitado, recordemos las propiedades básicas de los proyectores. La aplicación de $\hat{P}_n = \mid n\rangle\langle n \mid$ a un vector de estado arbitrario $\mid \psi\rangle$ da un vector en la dirección de $\mid n\rangle$ de magnitud igual a la componente de $\mid \psi\rangle$ en dicha dirección, que es precisamente la propiedad que se esperaría de un proyector:

$$\hat{P}_n \mid \psi\rangle = \mid n\rangle \langle n \mid\psi\rangle = c_n \mid n\rangle, \quad c_n = \langle n \mid\psi\rangle . \tag{VIII.93}$$

Suponiendo que el conjunto de vectores $\{\mid n\rangle\}$ forma una base ortonormal, podemos escribir

$$\hat{P}_n\hat{P}_m = \mid n\rangle \langle n \mid m\rangle \langle m\mid = \delta_{nm} \mid n\rangle \langle m\mid \tag{VIII.94}$$

o bien,

$$\hat{P}_n \, \hat{P}_m = \begin{cases} \hat{P}_n, & \text{si } n = m, \\ 0, & \text{si } n \neq m, \end{cases} \tag{VIII.95}$$

que muestra que los operadores $\hat{P}_n$ que proyectan sobre subespacios disjuntos son ortogonales; además, para $n = m$ se tiene

$$\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n, \tag{VIII.96}$$

de donde sigue, por k aplicaciones sucesivas, que el proyector $\hat{P}_n$ es idempotente:

$$\hat{P}_n^k = \hat{P}_n, \quad k = 1, 2, 3, \ldots \tag{VIII.97}$$

Finalmente, como el conjunto $\{\mid n\rangle\}$ forma una base completa, se cumple que

$$\sum_n \mid n\rangle\langle n \mid = \sum_n \hat{P}_n = 1, \tag{VIII.98}$$

donde la suma se extiende sobre todos los valores de n (todas las direcciones del correspondiente espacio de Hilbert).

Para determinar los valores propios de un proyector se puede proceder como sigue. Consideremos uno de sus eigenvectores $\mid \varphi\rangle$, para el que debe cumplirse que, con λ el correspondiente eigenvalor,

$$\hat{P}_n \mid \varphi\rangle = \mid n\rangle \langle n \mid \varphi\rangle = \lambda \mid \varphi\rangle. \tag{VIII.99}$$

El vector en la expresión del centro es colineal con $\mid n\rangle$, o bien cero, por lo que las soluciones de esta ecuación son: a) $\mid \varphi\rangle = \mid n\rangle$, con eigenvalor $\lambda = 1$, o b) una de las $\mid \varphi\rangle$ ortogonales a $\mid n\rangle$ (de tal manera que $\langle n \mid \varphi\rangle = 0$) con eigenvalor $\lambda = 0$. Por lo tanto, el espectro de cualquier proyector contiene sólo el par de eigenvalores 0 y 1, de los cuales el segundo es no degenerado, pero el primero puede poseer degeneración arbitraria, incluso infinita para un espacio de Hilbert de dimensión infinita.[3]

El cálculo anterior se generaliza sin dificultad a los operadores elementales $\mathcal{O}_{nm} = |n\rangle \langle m\,|$. Para ellos tenemos:

$$\mathcal{O}_{nm}\mathcal{O}_{ab} = |n\rangle \langle m\,|a\rangle \langle b\,| = \delta_{am}\,|n\rangle \langle b\,| = \delta_{am}\mathcal{O}_{nb}. \tag{VIII.100}$$

De este resultado sigue que los productos de *cualquier número* de operadores elementales se reducen a un solo operador elemental y coeficientes numéricos, de donde sigue que todo operador (que pueda expresarse como serie de potencias de estos operadores elementales) se reduce a una combinación lineal de ellos:

$$\hat{F} = \sum_{mn} c_{nm}\mathcal{O}_{nm}, \quad c_{nm} = \langle n|\,\hat{F}\,|m\rangle = F_{nm}. \tag{VIII.101}$$

Este es el resultado (T8.44) del texto, obtenido aquí de manera un tanto más intuitiva.

[3]El subespacio propio asociado al valor propio $\lambda = 0$ es llamado *suplemento* de $|n\rangle$. La ecuación (VIII.95) dice así que $\hat{P}_n\hat{P}_m = 0$ si $|n\rangle$ y $|m\rangle$ corresponden a espacios mutuamente suplementarios.

VIII.19 Sea $\hat{L}$ un operador lineal hermitiano que define un conjunto completo de funciones propias ortonormalizadas $\varphi_n(x)$ con valores propios λ_n. Demuestre que una solución de la ecuación diferencial

$$\left(\hat{L}-\lambda\right)u(x)=F(x),$$

en donde $F(x)$ es una función conocida, se puede expresar en la forma

$$u=\int\sum_k\frac{\varphi_k^*(x')\,\varphi_k(x)}{\lambda_k-\lambda}F(x')\,dx'.$$

Este resultado muestra que la función de Green del problema se puede escribir como

$$G(x,x')=\sum_k\frac{\varphi_k^*(x')\,\varphi_k(x)}{\lambda_k-\lambda}.$$

Muestre que la función de Green se puede expresar alternativamente en la forma abstracta

$$\hat{G}=\sum_k\frac{|\,k\rangle\langle k\,|}{\lambda_k-\lambda}.$$

Propongamos que la solución $u(x)$ de la ecuación diferencial con fuente

$$\left(\hat{L}-\lambda\right)u(x)=F(x) \tag{VIII.102}$$

se puede escribir como una combinación lineal de las eigenfunciones de $\hat{L}$, es decir, de las eigenfunciones de la ecuación homogénea

$$\left(\hat{L}-\lambda_l\right)\varphi_l(x)=0 \tag{VIII.103}$$

que satisfacen condiciones apropiadas de continuidad, de frontera, etc. Por lo tanto, escribimos

$$u(x)=\sum_l a_l\varphi_l. \tag{VIII.104}$$

Sustituyendo en (VIII.102) se obtiene

$$\left(\hat{L}-\lambda\right)\sum_l a_l\varphi_l=F(x),$$

o bien, introduciendo (VIII.103),

$$\sum_l a_l(\lambda_l-\lambda)\varphi_l=F(x). \tag{VIII.105}$$

Para determinar los coeficientes a_k se multiplica (VIII.105) por φ_k^* e integra sobre todo el espacio; usando la condición de ortonormalidad de las eigenfunciones $\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_k^*\varphi_l dx=\delta_{kl}$ se llega de inmediato a

$$a_k(\lambda_k-\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_k^*(x)\,F(x)\,dx, \tag{VIII.106}$$

de donde sigue, para $\lambda_k - \lambda \neq 0$,

$$a_k = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varphi_k^*(x)\, F(x)}{\lambda_k - \lambda} dx. \tag{VIII.107}$$

Sustituyendo esta última expresión en la ecuación (VIII.104) se alcanza el resultado solicitado:

$$u(x) = \int \sum_k \frac{\varphi_k^*(x')\, \varphi_k(x)}{\lambda_k - \lambda} F\left(x'\right) dx'. \tag{VIII.108}$$

La función de Green de la ecuación diferencial (VIII.102) es solución de la correspondiente ecuación para fuente puntual, es decir,

$$\left(\hat{L} - \lambda\right) G\left(x|x'\right) = \delta(x - x'); \tag{VIII.109}$$

en términos de ella la solución de la ecuación inhomogénea con fuente $F(x')$ se escribe en la forma

$$u(x) = \int G(x, x') F\left(x'\right) dx', \tag{VIII.110}$$

como es fácil verificar por sustitución directa. Comparando con la ecuación (VIII.108) se alcanza el resultado solicitado:

$$G\left(x, x'\right) = \sum_k \frac{\varphi_k^*(x')\, \varphi_k(x)}{\lambda_k - \lambda}. \tag{VIII.111}$$

Los resultados anteriores se escriben empleando la notación de Dirac en la forma

$$G(x, x') \equiv \langle x|\, \hat{G}\, |x'\rangle = \sum_k \frac{\varphi_k^*(x')\, \varphi_k(x)}{\lambda_k - \lambda} = \sum_k \frac{\langle x|\, k\,\rangle\langle\, k\,|x'\rangle}{\lambda_k - \lambda}, \tag{VIII.112}$$

de donde sigue que el operador de Green está dado por

$$\hat{G} = \sum_k \frac{|k\rangle\, \langle k|}{\lambda_k - \lambda}. \tag{VIII.113}$$

Los elementos de matriz de este operador dan la función de Green en la correspondiente representación.

VIII.20 Demuestre que

$$[\hat{p}, \operatorname{sen} \lambda x] = -i\lambda\hbar \cos \lambda x,$$
$$[\hat{p}, \cos \lambda x] = i\lambda\hbar \operatorname{sen} \lambda x$$

y que, por lo tanto,

$$\Delta\hat{p}\Delta \operatorname{sen} \lambda x \geq \frac{\lambda\hbar}{2} \left|\langle \cos \lambda x\rangle\right|,$$
$$\Delta\hat{p}\Delta \cos \lambda x \geq \frac{\lambda\hbar}{2} \left|\langle \operatorname{sen} \lambda x\rangle\right|,$$

donde Δx representa la desviación cuadrática media[4] de x, $\Delta x = \sqrt{(x - \bar{x})^2}$.

[4]Mayores detalles se pueden ver en W. Silvert, *Phys. Rev.* **D2** (1970) 633.

Para una función de onda ψ arbitraria podemos escribir

$$\begin{aligned}[\hat{p}, \operatorname{sen}\lambda x]\,\psi &= -i\hbar\left[\frac{\partial}{\partial x}, \operatorname{sen}\lambda x\right]\psi \\ &= -i\hbar\left(\operatorname{sen}\lambda x\frac{\partial\psi}{\partial x} + \lambda\cos\lambda x\psi - \operatorname{sen}\lambda x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right);\end{aligned}$$

o bien, simplificando y tomando en cuenta la arbitrariedad de ψ,

$$[\hat{p}, \operatorname{sen}\lambda x] = -i\hbar\lambda\cos\lambda x. \tag{VIII.114}$$

De manera análoga, de

$$\begin{aligned}[\hat{p}, \cos\lambda x]\,\psi &= \left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \cos\lambda x\right]\psi \\ &= -i\hbar\cos\lambda x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\lambda\operatorname{sen}\lambda x\psi + i\hbar\cos\lambda x\frac{\partial\psi}{\partial x},\end{aligned}$$

se obtiene

$$[\hat{p}, \cos\lambda x] = i\hbar\lambda\operatorname{sen}\lambda x. \tag{VIII.115}$$

Las desigualdades de Heisenberg establecen que si $\hat{A}$ y $\hat{B}$ son dos operadores hermitianos con conmutador $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\hat{C}$, el producto de sus dispersiones posee una cota inferior para $\left\langle\hat{C}\right\rangle \neq 0$; específicamente, se cumple la ecuación (T8.70), es decir,

$$\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle\left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle \geq \frac{1}{4}\left\langle\hat{C}\right\rangle^2. \tag{VIII.116}$$

Aplicando este resultado al caso presente se obtiene (con $\Delta\hat{A} = \left\langle\left(\hat{A} - \overline{\hat{A}}\right)^2\right\rangle^{1/2}$)

$$\Delta\hat{p}\Delta\operatorname{sen}\lambda x \geq \frac{\lambda\hbar}{2}\left|\langle\cos\lambda x\rangle\right|, \tag{VIII.117}$$

$$\Delta\hat{p}\Delta\cos\lambda x \geq \frac{\lambda\hbar}{2}\left|\langle\operatorname{sen}\lambda x\rangle\right|. \tag{VIII.118}$$

Con $\lambda \to 0$ la ecuación (VIII.117) (dividida entre λ) se reduce a la desigualdad usual de Heisenberg para $\hat{x}$ y $\hat{p}$.

VIII.21 Demuestre que un paquete minimal de electrones libres cumple con la ley asintótica $\Delta x \approx t\Delta v_0$, en donde Δx es la dispersión de la posición, Δv_0 es la dispersión inicial de la velocidad y t es el tiempo transcurrido, que debe ser suficientemente largo para que pueda considerarse establecido el régimen asintótico. ¿Cómo precisaría esta última condición? Use el resultado para mostrar que si la dispersión inicial de la posición es del orden de milímetros, podemos esperar que al cabo de algunos segundos Δx sea del orden de metros.

En el problema VIII.17 vimos que el paquete de mínima dispersión es gaussiano, y en el problema V.10 se encontró que la variancia de x del paquete gaussiano que se propaga libremente está dada por la expresión[5]

$$\sigma_x^2 = \sigma_0^2\left(1 + \frac{\hbar^2t^2}{4m^2\sigma_0^4}\right). \tag{VIII.119}$$

[5]Este sistema se trata también en el problema ilustrativo 9.3 del texto.

De aquí sigue que la desviación estándar (o desviación cuadrática media, o dispersión) $\Delta x = \sqrt{\sigma_x^2}$ es

$$\Delta x = \sigma_0 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma_0^4}}. \tag{VIII.120}$$

Para tiempos suficientemente grandes, tales que

$$t \gg \frac{2m\sigma_0^2}{\hbar}, \tag{VIII.121}$$

la desviación estándar se puede aproximar por

$$\Delta x \approx \frac{\hbar t}{2m\sigma_0}. \tag{VIII.122}$$

La ecuación (VIII.121) fija lo que debe entenderse por tiempos grandes en el presente problema. Para determinar σ_0 tomamos en consideración que el paquete es minimal, por lo que se cumple que

$$\Delta x_0 \Delta p_0 = \frac{\hbar}{2},$$

y con $\Delta p_0 = m\Delta v_0$, en donde Δv_0 es la dispersión de la velocidad inicial, queda

$$\sigma_0 = \Delta x_0 = \frac{\hbar}{2m\Delta v_0}. \tag{VIII.123}$$

De aquí sigue de inmediato el resultado solicitado:

$$\Delta x = t\Delta v_0. \tag{VIII.124}$$

Para estimar valores numéricos representativos, supondremos que la dispersión inicial en la posición es del orden $\sigma_0 \sim 10^{-3}$m; este dato corresponde a una dispersión en la velocidad inicial de valor

$$\Delta v_0 = \frac{\hbar}{2m\sigma_0} \sim 6 \times 10^{-2} \text{ m/s}$$

y por "tiempos grandes" debemos entender en este caso

$$t \gg \frac{2m\sigma_0^2}{\hbar} \sim 2 \times 10^{-2} \text{ s}.$$

Para $t \sim 10^2$s, de (VIII.122) se obtiene $\Delta x \sim 6$m; o sea que para obtener $\Delta x \sim 1$m bastan 16 segundos.

Es claro del ejemplo que por pequeña (pero realista) que sea la dispersión de la posición inicial, bastarán algunos segundos o minutos para que el paquete alcance dimensiones macroscópicas. Fue precisamente el valor ilimitado que la dispersión espacial del paquete puede adquirir con el curso del tiempo lo que impidió aceptar la propuesta inicial de Schrödinger, en el sentido de identificar a la función de onda con el propio electrón.

VIII.2. Problemas adicionales

VIII.22 La ecuación diferencial

$$-\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + x^2\varphi(x) = \lambda\varphi(x)$$

posee una pareja de soluciones para todos los valores de λ; es característico de estas soluciones que se van a $\pm\infty$ cuando $|x| \to \infty$. Demuestre mediante un análisis directo que para ciertos valores de λ (es decir, los eigenvalores) sucede que $\varphi(x) \to 0$ para $|x| \to \infty$. Estas son las únicas soluciones de cuadrado integrable que posee esta ecuación.

El comportamiento asintótico para $|x| \to \infty$ de las soluciones de la ecuación diferencial

$$-\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + x^2\varphi(x) = \lambda\varphi(x) \tag{VIII.125}$$

se obtiene resolviendo la ecuación asintótica

$$-\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + x^2\varphi(x) = 0, \tag{VIII.126}$$

que se obtiene de la anterior considerando que para $x^2 \gg \lambda$ el término $\lambda\varphi$ es despreciable frente al término $x^2\varphi$. Como interesa sólo la solución de esta última ecuación para $|x| \to \infty$, la podemos escribir como $\varphi(x) \sim e^{\eta x^2}$, pues sustituyendo y despreciando los términos pequeños se obtiene

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = \frac{d\varphi'(x)}{dx} = 2\eta\frac{dx\varphi}{dx} \simeq 2\eta x\frac{d\varphi}{dx} = 4\eta^2x^2\varphi = x^2\varphi, \tag{VIII.127}$$

donde la última igualdad viene de (VIII.126). Para que esta ecuación se cumpla debemos poner $4\eta^2 = 1$, lo que da dos soluciones independientes en el infinito: $\varphi \sim e^{x^2/2}$ y $\varphi \sim e^{-x^2/2}$. La primera familia de estas soluciones no nos sirve por carecer de interés físico, por lo que para obtener soluciones de (VIII.125) que se anulan en el infinito debemos poner

$$\varphi(x) = e^{-x^2/2}u(x). \tag{VIII.128}$$

Hay dos posibles comportamientos de la función $u(x)$ en el infinito. Por un lado, puede crecer como e^{x^2} y transformar el comportamiento asintótico $e^{-x^2/2}$ en $e^{-x^2/2}e^{x^2} = e^{x^2/2}$; es claro que estas soluciones no nos interesan. La otra posibilidad, que es la de interés aquí, es que $u(x)$ crezca mucho más limitadamente en el infinito que el exponencial, de tal manera que la solución dada por (VIII.128) se anule (exponencialmente) en el infinito. Vamos a verificar que este tipo de soluciones existe, que las correspondientes eigenfunciones forman un conjunto discreto, que para ellas el factor $u(x)$ se reduce a un polinomio, y que los correspondientes eigenvalores λ están dados por los números enteros impares $\lambda = 1, 3, 5, \ldots$

Sustituyendo (VIII.128) en la ecuación original (VIII.125), se obtiene después de simplificar los factores comunes

$$-\frac{d^2u}{dx^2} + 2x\frac{du}{dx} + (1-\lambda)u = 0. \tag{VIII.129}$$

Buscaremos una solución de esta ecuación de la forma

$$u(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 + \cdots = \sum_k c_kx^k. \tag{VIII.130}$$

Sustituyendo (VIII.130) en (VIII.129) y anulando por separado el coeficiente de cada potencia x^k para garantizar que la ecuación se satisface idénticamente para todo valor de x, se obtiene el sistema de ecuaciones algebraicas

$$\begin{aligned} -2c_2 + (1-\lambda)c_0 &= 0, && \text{(VIII.131)}\\ -6c_3 + (3-\lambda)c_1 &= 0, && \text{(VIII.132)}\\ -12c_4 + (5-\lambda)c_2 &= 0, \quad \text{etc.} && \text{(VIII.133)} \end{aligned}$$

Las soluciones de este sistema son

$$\begin{aligned} c_2 &= \tfrac{1}{2}(1-\lambda)c_0, && \text{(VIII.134)}\\ c_3 &= \tfrac{1}{6}(3-\lambda)c_1, && \text{(VIII.135)}\\ c_4 &= \tfrac{1}{12}(5-\lambda)c_2 = \tfrac{1}{24}(1-\lambda)(5-\lambda)c_0, \quad \text{etc.} && \text{(VIII.136)} \end{aligned}$$

Las cantidades c_0 y c_1 son independientes y determinan el resto de coeficientes. De estas ecuaciones sigue que si λ toma cualquiera de los valores $1, 5, 9, \ldots$ y se pone $c_1 = 0$, la solución obtenida se reduce a un polinomio; el valor asignado a λ garantiza que $c_k = 0$ para $k \geq \lambda$. Un comportamiento similar ocurre si se toma $\lambda = 3, 7, 11, \ldots$ y $c_0 = 0$. En todos estos casos la serie en la ecuación (VIII.130) se corta en el valor finito de k fijado por λ, y la función $\varphi(x) = e^{-x^2/2}u(x)$ decae exponencialmente a cero en el infinito, pues toma la forma asintótica $\varphi(x) \sim x^{\lambda-2}e^{-x^2/2}$, $x \to \pm\infty$. También es claro que para cualquier otro valor de λ la serie contiene un número infinito de términos y rompe con este comportamiento asintótico.

* **VIII.23** Proponga un procedimiento algebraico general para determinar los vectores y valores propios de un operador lineal.

Sea $\hat{F}$ el operador cuyos eigenvectores $|\varphi\rangle$ y eigenvalores f deben encontrarse:

$$\hat{F}\,|\varphi\rangle = f\,|\varphi\rangle\,. \tag{VIII.137}$$

Escogemos una base apropiada, pero arbitraria por lo demás, $\{|u_n\rangle\}$, y proyectamos la ecuación anterior sobre alguno de los vectores de esta base:

$$\langle u_i|\,\hat{F}\,|\varphi\rangle = f\,\langle u_i\,|\varphi\rangle\,. \tag{VIII.138}$$

Insertando el correspondiente desarrollo de la unidad, obtenemos

$$\sum_j \langle u_i|\,\hat{F}\,|u_j\rangle\,\langle u_j\,|\varphi\rangle = f\,\langle u_i\,|\varphi\rangle\,, \tag{VIII.139}$$

es decir, con $c_i = \langle u_i\,|\varphi\rangle$, $\hat{F}_{ij} = \langle u_i|\,\hat{F}\,|u_j\rangle$,

$$\sum_j \left(\hat{F}_{ij} - f\delta_{ij}\right) c_j = 0. \tag{VIII.140}$$

Éste es un sistema lineal y homogéneo de ecuaciones simultáneas para las incógnitas c_k (componentes de los vectores propios buscados en la representación escogida) y los eigenvalores f. Por tratarse de un sistema homogéneo, para que existan soluciones no triviales es necesario y suficiente que el determinante de los coeficientes del sistema se anule, por lo que se debe cumplir

$$\det\left(\hat{F} - f\mathbb{I}\right) = 0, \tag{VIII.141}$$

en donde $\hat{F}$ es la matriz con elementos $\hat{F}_{ij}$ y $\mathbb{I}$ es la matriz unidad. La ecuación (VIII.141) es la llamada ecuación característica o secular, y su solución determina los eigenvalores f.[6] Éste es un resultado muy importante: los valores propios de un operador son las raíces de su ecuación característica.

Las raíces f pueden ser simples o múltiples. Supongamos que una raíz, f_1, digamos, es simple; sustituyendo su valor en el sistema de ecuaciones (VIII.140) obtenemos $N-1$ ecuaciones independientes (la restante es linealmente dependiente de las anteriores debido a que se cumple la ecuación secular), lo que permite determinar $N-1$ coeficientes c_k en términos de uno de ellos, c_1, digamos. El eigenvector correspondiente es la combinación lineal

$$|\varphi\rangle = \sum_k c_k \, |u_k\rangle \, , \tag{VIII.142}$$

en donde c_1 se fija mediante la condición de normalización. Vemos que en este caso el eigenvector (normalizado) es único. Esto es consecuencia particular de un teorema general que establece que el orden de degeneración de un eigenvalor de un operador hermitiano es igual a la multiplicidad de la correspondiente raíz de la ecuación característica. Las raíces múltiples conducen, por lo tanto, a soluciones degeneradas y su tratamiento es más elaborado; en los textos de álgebra se pueden encontrar los detalles.[7]

VIII.24 Demuestre que el operador de paridad definido por la regla

$$\hat{P}\psi\,(x) = \psi\,(-x)$$

es hermitiano. Encuentre las eigenfunciones correspondientes a cada uno de los posibles eigenvalores y demuestre que son ortogonales.

Además de la relación de definición dada arriba,

$$\hat{P}\psi\,(x) = \psi\,(-x)\,, \tag{VIII.143}$$

podemos escribir, haciendo actuar a $\hat{P}$ sobre la función ψ^*:

$$\hat{P}\psi^*\,(x) = \psi^*\,(-x)\,.$$

Tomando la conjugada de esta expresión se obtiene

$$\hat{P}^*\psi\,(x) = \psi\,(-x)\,. \tag{VIII.144}$$

Consideremos ahora dos funciones $\psi\,(x)$ y $\varphi\,(x)$ de cuadrado integrable; podemos escribir

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\,(x)\,\hat{P}\varphi\,(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\,(x)\,\varphi\,(-x)\,dx. \tag{VIII.145}$$

Haciendo el cambio de variable $x \to -x$, esta relación se transforma, con ayuda de (VIII.144), en

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\,(x)\,\hat{P}\varphi\,(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\,(-x)\,\varphi\,(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi\,(x)\,\hat{P}^*\psi^*\,(x)\,dx, \tag{VIII.146}$$

[6] Si el espacio de Hilbert es de dimensión N, las matrices son de dimensión $N \times N$, hay N ecuaciones y el mismo número de eigenvalores, iguales o diferentes.

[7] Puede consultarse, por ejemplo, Butkov (1968), capítulo 10. Un problema algebraico análogo se trata en la sección 14.3 del texto.

que es una de las formas de la condición de hermiticidad, ecuación (VIII.12). Esto muestra que, en efecto, el operador de paridad es hermitiano.

Los valores propios del operador de paridad se pueden determinar fácilmente al considerar dos aplicaciones sucesivas de este operador sobre alguna de sus funciones propias, procedimiento que conduce a la función original; de esta manera, de[8]

$$\hat{P}\psi\left(x\right)=\lambda\psi\left(x\right) \tag{VIII.147}$$

sigue que

$$\hat{P}^{2}\psi\left(x\right)=\hat{P}\psi\left(-x\right)=\psi\left(x\right)=\lambda^{2}\psi\left(x\right),\quad\Rightarrow\lambda=\pm1. \tag{VIII.148}$$

Sea ahora $\psi\left(x\right)$ una función de onda de paridad arbitraria. Combinando la pareja de ecuaciones

$$\hat{P}\psi\left(x\right)=\psi\left(-x\right),\quad\hat{P}\psi\left(-x\right)=\psi\left(x\right) \tag{VIII.149}$$

se pueden construir las eigenfunciones correspondientes a los eigenvalores $\lambda=\pm1$, respectivamente. Para hacer esto notamos que

$$\hat{P}\left[\psi\left(x\right)+\psi\left(-x\right)\right]=\psi\left(x\right)+\psi\left(-x\right) \tag{VIII.150}$$

y que

$$\hat{P}\left[\psi\left(x\right)-\psi\left(-x\right)\right]=-\left[\psi\left(x\right)-\psi\left(-x\right)\right]. \tag{VIII.151}$$

De aquí sigue que las funciones de onda que pueden construirse a partir de $\psi(x)$ y que poseen paridad bien definida $+1$ o -1, respectivamente, son (debidamente normalizadas)

$$\psi^{(+)}(x)=\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi(x)+\psi(-x)\right], \tag{VIII.152}$$

$$\psi^{(-)}(x)=\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi(x)-\psi(-x)\right]. \tag{VIII.153}$$

La ortogonalidad de $\psi^{(+)}$ y $\psi^{(-)}$ sigue de inmediato del hecho de que son funciones propias de un operador hermitiano que pertenecen a diferentes valores propios. El cálculo directo verifica este resultado, como es de esperarse:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{(+)*}\psi^{(-)}dx &= \tfrac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\psi^{*}\left(x\right)+\psi^{*}\left(-x\right)\right)\left(\psi\left(x\right)-\psi\left(-x\right)\right)\,dx\\ &= \tfrac{1}{2}\left\{\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\left(x\right)\psi\left(x\right)\,dx-\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\left(x\right)\psi\left(-x\right)\,dx\right.\\ &\quad+\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\left(x\right)\psi\left(-x\right)\,dx\\ &\quad\left.-\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\left(x\right)\psi\left(x\right)\,dx\right\}=0.\end{aligned} \tag{VIII.154}$$

VIII.25 Considere una función $f\left(z\right)$ que puede ser expresada en términos de una serie de potencias en la forma $f\left(z\right)=\sum_{n=0}^{\infty}c_{n}z^{n}$. El operador $\hat{f}\left(\hat{A}\right)$ se define entonces como

$$\hat{f}\left(\hat{A}\right)=\sum_{n=0}^{\infty}c_{n}\hat{A}^{n},$$

[8]El operador de paridad se estudia en las secciones 9.6 y 12.2 del texto.

para un operador $\hat{A}$ apropiado (acotado). Demuestre que el operador

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = \exp(i\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{a}/\hbar),$$

con $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ es el operador de traslación espacial que cumple con la propiedad

$$\hat{T}(\mathbf{a})\,\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}+\mathbf{a}).$$

La definición de $\hat{f}\left(\hat{A}\right)$ dada arriba queda incompleta mientras no se especifique un criterio que establezca cuándo una serie $\hat{S}_n (= \sum_{m=0}^{n} c_m \hat{A}^m)$ de operadores, definidos en un espacio completo de Hilbert $\mathcal{H}$, converge a un operador $\hat{S}$. Sin embargo, no existe un criterio de convergencia único en relación con los operadores. Por ejemplo, podemos considerar que $\hat{S}_n \to \hat{S}$ significa que para funciones arbitrarias $\varphi_m(x) \in \mathcal{H}$, las funciones $\hat{S}_n\varphi_m(x) \to \hat{S}\varphi_m(x)$ si se encuentran en $\mathcal{H}$. Otra posible definición se obtiene al asignar una norma, $\sup_{\varphi_m(x)\in H} \left\|\hat{O}\varphi_m(x)\right\| / \|\varphi_m(x)\|$, a un operador $\hat{O}$ y considerar que $\hat{S}_n \to \hat{S}$ si $\left\|\hat{S}_n \to \hat{S}\right\| \to 0$.

El sentido de $\hat{T}(\mathbf{a})$ como operador de translación se demuestra considerando el correspondiente desarrollo en serie formal de potencias y sumando la serie de Taylor resultante:

$$\begin{aligned}
\hat{T}(\mathbf{a})\,\psi(\mathbf{x}) &= \exp\left(\frac{i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{a}}{\hbar}\right)\psi(\mathbf{x}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[\frac{i(-i\hbar\nabla)\cdot\mathbf{a}}{\hbar}\right]^n\psi(\mathbf{x}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[\mathbf{a}\cdot\nabla]^n\,\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}+\mathbf{a}). \qquad \text{(VIII.155)}
\end{aligned}$$

VIII.26 Demuestre que la función $f_n\left(\hat{A}\right) = \hat{A}^n$ cumple la relación $f_n\left(\hat{A}\right) f_m\left(\hat{A}\right) = f_{n+m}(\hat{A})$, para $\hat{A}$ un operador hermitiano.

Tomamos como base la constituida por los vectores propios $|a_i\rangle$ de $\hat{A}$, y escribimos, usando (T8.46b),

$$\hat{A}\,|a_i\rangle = a_i\,|a_i\rangle\,; \quad \hat{A} = \sum_i a_i\,|a_i\rangle\langle a_i|\,;$$

combinando con la regla general $\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n \Rightarrow G(\hat{F})\psi_n = G(f_n)\psi_n$ discutida en la sección 8.5 del texto, podemos escribir

$$f\left(\hat{A}\right) = \sum f(a_i)\,|a_i\rangle\langle a_i|. \qquad \text{(VIII.156)}$$

Para $f_n(x) = x^n$ se obtiene

$$\hat{A}^n = \sum a_i^n\,|a_i\rangle\langle a_i|. \qquad \text{(VIII.157)}$$

Usando este resultado podemos escribir

$$\begin{aligned}
\hat{A}^n\hat{A}^m &= \sum_{i,j} a_i^n a_j^m\,|a_i\rangle\langle a_i \mid a_j\rangle\langle a_j| = \sum_{i,j} a_i^n a_j^m\delta_{ij}\,|a_i\rangle\langle a_j| \\
&= \sum_i a_i^{n+m}\,|a_i\rangle\langle a_i| = \hat{A}^{n+m}.
\end{aligned}$$

La identificación $\hat{A}^n = f_n\left(\hat{A}\right)$ conduce directamente al resultado solicitado:

$$f_n\left(\hat{A}\right) f_m\left(\hat{A}\right) = f_{n+m}(\hat{A}). \tag{VIII.158}$$

VIII.27 Demuestre que si un observable tiene valor bien definido en un estado arbitrario dado, entonces a dicho estado corresponde necesariamente una eigenfunción de la variable dinámica en cuestión.

Llamaremos $\hat{\Omega}$ al operador que corresponde a la variable dinámica en cuestión. Por hipótesis, el sistema ha sido preparado de tal manera que en el estado dado, que denotaremos con $|\psi_i\rangle$, el valor de $\hat{\Omega}$ está bien definido; llamaremos a este valor ω_i. Esta condición la podemos enunciar diciendo que, en el estado dado, la dispersión del operador $\hat{\Omega}$ es nula (cf. ecuación (T8.61)), lo que podemos escribir en la forma

$$\left\langle \psi_i \left| \hat{\Omega}^2 - \left\langle \hat{\Omega} \right\rangle_i^2 \right| \psi_i \right\rangle = 0, \tag{VIII.159}$$

o bien, usando la ecuación (T8.60),

$$\int \psi_i^* \left(\hat{\Omega} - \left\langle \hat{\Omega} \right\rangle_i\right)^2 \psi_i \, dx = 0, \tag{VIII.160}$$

o sea, con

$$\omega_i = \left\langle \hat{\Omega} \right\rangle_i, \tag{VIII.161}$$

$$\int \psi_i^* \left(\hat{\Omega} - \omega_i\right)^2 \psi_i \, dx = 0. \tag{VIII.162}$$

Tomando en cuenta que la hermiticidad de $\hat{\Omega}$, significa que

$$\int \psi_i^* \hat{\Omega} \psi_j dx = \int \left(\hat{\Omega}\psi_i\right)^* \psi_j dx,$$

la ecuación (VIII.162) puede reescribirse sucesivamente en la forma

$$\begin{aligned} \int \psi_i^* \left(\hat{\Omega} - \omega_i\right)^2 \psi_i \, dx &= \int \psi_i^* \left(\hat{\Omega} - \omega_i\right) \left[\left(\hat{\Omega} - \omega_i\right) \psi_i\right] dx \\ &= \int \left[\left(\hat{\Omega} - \omega_i\right) \psi_i\right]^* \left(\hat{\Omega} - \omega_i\right) \psi_i \, dx \\ &= \int \left|\left(\hat{\Omega} - \omega_i\right) \psi_i\right|^2 dx = 0. \end{aligned} \tag{VIII.163}$$

Esta expresión puede satisfacerse en cada caso (para cualquier valor de i) sólo si se cumple

$$\left(\hat{\Omega} - \omega_i\right) \psi_i = 0, \tag{VIII.164}$$

es decir,

$$\hat{\Omega}\psi_i = \omega_i \psi_i, \quad \omega_i = \left\langle \hat{\Omega} \right\rangle_i. \tag{VIII.165}$$

Como hemos llegado a una ecuación de eigenvalores, se comprueba que ψ_i es necesariamente una eigenfunción de $\hat{\Omega}$. Además, coinciden el eigenvalor ω_i y el valor esperado de $\hat{\Omega}$ en el correspondiente eigenestado $\left\langle \hat{\Omega} \right\rangle_i$.

Incidentalmente, es útil observar que la ecuación (VIII.163) permite expresar la variancia (o dispersión) del operador genérico $\hat{\Omega}$ en la forma

$$\left\langle \left(\Delta\hat{\Omega}\right)^2 \right\rangle = \int \left| \left(\Delta\hat{\Omega}\right) \psi_i \right|^2 dx. \tag{VIII.166}$$

VIII.28 Sea $\hat{C}$ el operador de conjugación de carga (este operador transforma una partícula en su antipartícula); como su doble aplicación significa el retorno al estado inicial, debe ser $\hat{C}^2 = \mathbb{I}$; además, se sabe que $\hat{C}$ anticonmuta con el operador de carga $\hat{Q}$, $\hat{C}\hat{Q} = -\hat{Q}\hat{C}$. Utilice esta información para demostrar que la carga media de los estados propios de $\hat{C}$ es nula.

Sea $|\varphi\rangle$ un eigenvector del operador de conjugación de carga, de tal manera que

$$\hat{C}\,|\varphi\rangle = \lambda\,|\varphi\rangle\,. \tag{VIII.167}$$

Aplicando una vez más el operador $\hat{C}$, obtenemos

$$\hat{C}^2\,|\varphi\rangle = |\varphi\rangle = \lambda^2\,|\varphi\rangle\,, \tag{VIII.168}$$

por lo que los valores propios de $\hat{C}$ son $\lambda = \pm 1$ (el caso $|\varphi\rangle = 0$ se excluye por irrelevante). Por otra parte, aplicando $\hat{Q}$ se obtiene

$$\hat{Q}\hat{C}\,|\varphi\rangle = \lambda\hat{Q}\,|\varphi\rangle \quad \Rightarrow \lambda\hat{Q}\hat{C}\,|\varphi\rangle = \hat{Q}\,|\varphi\rangle\,. \tag{VIII.169}$$

De aquí, y tomando en cuenta la propiedad de anticonmutación, se obtiene

$$\langle\varphi|\,\hat{Q}\,|\varphi\rangle = \lambda\,\langle\varphi|\,\hat{Q}\hat{C}\,|\varphi\rangle = -\lambda\,\langle\varphi|\,\hat{C}\hat{Q}\,|\varphi\rangle = -\lambda^2\,\langle\varphi|\,\hat{Q}\,|\varphi\rangle = -\,\langle\varphi|\,\hat{Q}\,|\varphi\rangle\,, \tag{VIII.170}$$

de donde sigue el resultado solicitado:

$$\langle\varphi|\,\hat{Q}\,|\varphi\rangle = 0. \tag{VIII.171}$$

VIII.29 Demuestre que la función de onda en la representación de momentos y la correspondiente función de onda en la representación de coordenadas están relacionadas por una transformación de Fourier.

Sean $|\psi\rangle$ el estado estudiado y $\psi(x) = \langle x\,|\psi\rangle$ la correspondiente función de onda en la representación de coordenadas. Insertando la relación de completez en el espacio momental podemos escribir

$$\psi(x) = \langle x\,|\psi\rangle = \int \langle x\,|p\rangle\,\langle p\,|\psi\rangle\,dp = \int \varphi_p(x)\Psi(p)dp, \tag{VIII.172}$$

donde $\Psi(p) = \langle p\,|\psi\rangle$ es la función de onda del estado $|\psi\rangle$ en la representación p y $\varphi_p(x) = \langle x\,|p\rangle$ es el coeficiente de la transformación, dado por la función de onda de momento p en la representación x, es decir, por la función de onda de partícula libre con momento p:

$$\varphi_p(x) = \langle x\,|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}. \tag{VIII.173}$$

Combinando (VIII.172) y (VIII.173) se obtiene

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{ipx/\hbar}\Psi(p)dp = \tilde{\Psi}(x). \tag{VIII.174}$$

La inversa de esta expresión es

$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx = \tilde{\psi}(p), \qquad \text{(VIII.175)}$$

y muestra que las funciones de onda de un estado cualquiera en las representaciones de coordenadas y momental están relacionadas mediante una transformación de Fourier o su inversa.

VIII.3. Ejercicios

VIII.30 Este ejercicio consta de tres partes:

a) ¿Puede un operador unitario ser hermitiano? En caso de ser posible, indique cuáles pueden ser sus valores propios.

b) Sea $\hat{A}$ un operador que satisface la ecuación $\hat{A}^2 + 2a\hat{A} + 1 = 0$, con a una constante real. ¿Para qué valores de a el operador $\hat{A}$ es hermitiano?

c) Sea $\hat{B}$ un operador hermitiano que satisface la ecuación $\hat{B}^3 = 4\hat{B}$. ¿Cuáles son sus valores propios?

VIII.31 Demuestre que el operador unitario

$$\hat{U} = \frac{\mathbb{I} + i\hat{G}}{\mathbb{I} - i\hat{G}},$$

con $\hat{G}$ hermitiano, puede escribirse siempre como $\hat{U} = \exp i\hat{K}$, donde $\hat{K}$ es hermitiano. Encuentre la forma de la función $\hat{K}(\hat{G})$.

VIII.32 Considere la desigualdad

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| f \int_{-\infty}^{\infty} g^* g dx - g \int_{-\infty}^{\infty} g^* f dx \right|^2 dx \geq 0,$$

donde f y g son funciones arbitrarias de x; observe que la igualdad se satisface sólo cuando f y g son proporcionales. Establezca la siguiente desigualdad de Heisenberg generalizada (obtenida por vez primera por Schrödinger):

$$\left\langle \left(\Delta\hat{A}\right)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta\hat{B})^2 \right\rangle \geq \tfrac{1}{4} \left| \left\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} + \Delta\hat{B}\Delta\hat{A} \right\rangle \right|^2 + \tfrac{1}{4} \left| \left\langle [\hat{A}, \hat{B}] \right\rangle \right|^2.$$

Sugerencia: reemplace $f \to \Delta\hat{A}\psi$, $g \to \Delta\hat{B}\psi$.

VIII.33 Demuestre que

$$\left[\hat{A}, \frac{1}{\hat{B}}\right] = -\frac{1}{\hat{B}} \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \frac{1}{\hat{B}}.$$

VIII.34 Demuestre que en un estado estacionario el valor medio del momento se anula, $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = 0$.

VIII.35 Considere un sistema dinámico *clásico* con condiciones iniciales u otros parámetros pertinentes distribuidos, de tal manera que conviene hacer una descripción estadística de él. Definiendo como es usual los promedios, demuestre que para dos variables dinámicas reales arbitrarias se cumple la desigualdad

$$\overline{(\Delta A)^2}\,\overline{(\Delta B)^2} \geq \left(\overline{AB} - \overline{A}\,\overline{B}\right)^2.$$

VIII.36 Se tienen electrones confinados en un pozo rectangular infinito, en un estado descrito por la función de onda

$$\psi(x,t) = c_1\varphi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\varphi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar},$$

donde $E_2 > E_1$. Demuestre que el valor esperado del momento lineal oscila con frecuencia angular $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$, pero que la energía media es constante.

VIII.37 Considere partículas descritas por el paquete de ondas

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{1/a}, & \text{para } x_0 - a/2 < x < x_0 + a/2; \\ 0, & \text{en el resto del espacio.} \end{cases}$$

Demuestre que las componentes del momento lineal de este paquete son proporcionales a $[\mathrm{sen}(ap/2\hbar)/(ap/2\hbar)]\exp(-ipx_0/\hbar)$.

VIII.38 En la representación de momentos la variable dinámica p está dada por el número (la función) p. ¿Cuál debe ser la expresión de $\hat{x}$ para garantizar que se cumple la relación de conmutación apropiada?

VIII.39 La función de onda de un sistema es de la forma

$$\psi(x) = \varphi(x)e^{ip_0x/\hbar},$$

con $\varphi(x)$ una función real. ¿Cuál es el significado físico del parámetro p_0?

VIII.40 En la expresión $\psi(x) = \varphi(x+\bar{x})e^{-i\bar{p}x/\hbar}$, $\bar{x}$ y $\bar{p}$ denotan los respectivos valores esperados calculados sobre el estado φ, $\bar{x} = \langle\varphi|\,x\,|\varphi\rangle$, $\bar{p} = \langle\varphi|\,p\,|\varphi\rangle$. Determine los valores esperados de x y p que corresponden a la función de onda $\psi(x)$.

VIII.41 Investigue el límite $\lambda \to 0$ de la ecuación (VIII.118).

VIII.42 Utilice las desigualdades de Heisenberg para estimar la energía del estado base de partículas que se mueven en el potencial $V(x) = ax^4, a > 0$.

VIII.43 Considere que en cierto estado (cuya función de onda se anula suficientemente rápido en el infinito) la dispersión de la energía $\overline{H^2} - \bar{H}^2$ es nula en todo momento. Demuestre que se trata necesariamente de un estado estacionario en el que $E = \bar{H}$.

VIII.44 Utilice las desigualdades de Heisenberg para argumentar por qué que en un estado estacionario atómico no pueden existir electrones en la zona del núcleo.

VIII.45 Considere un operador $\hat{C}$ de conjugación que cambia una función por su compleja conjugada,

$$C\psi = \psi^*.$$

Determine:

a) si $\hat{C}$ es lineal y hermitiano o no;

b) los eigenvalores de $\hat{C}$ y

c) si las eigenfunciones de $\hat{C}$ forman un conjunto completo ortonormal.

Explique sus respuestas.

VIII.46 Demuestre que para $\hat{F}$ un operador hermitiano, se cumple

$$\int \psi^* \hat{F}^2 \psi dx = \int \left|\hat{F}\psi\right|^2 dx.$$

VIII.47 Para una partícula cuántica ligada a un potencial puede considerarse que la cantidad $a \equiv \left(8\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle\right)^{1/2}$ da una medida razonable del "tamaño" del sistema (el factor numérico se ha escogido para simplificar los coeficientes). Asimismo, para la mayoría de los casos el teorema del virial permite escribir, hasta factores numéricos del orden de la unidad, $|\langle E\rangle| \approx \langle T\rangle = \left\langle \mathbf{p}^2/2m \right\rangle$. Por ejemplo, esta relación es exacta (se cumple con signo $=$) para un pozo rectangular infinito o un átomo de hidrógeno. Demuestre que con estas convenciones se cumple que

$$\frac{a}{\lambda\!\!\!^{-}_C} \geqq \sqrt{\frac{mc^2}{|\langle E\rangle|}},$$

donde $\lambda\!\!\!^{-}_C = \hbar/mc$ es la longitud de Compton (dividida entre 2π). Utilice este resultado para verificar que para un átomo de hidrógeno se tiene $a \approx \lambda\!\!\!^{-}_C/\alpha$, donde $\alpha = e^2/\hbar c$ es la constante de estructura fina. ¿Qué tan localizada se debe encontrar la partícula para alcanzar el régimen relativista?

VIII.48 Con frecuencia las desigualdades de Heisenberg se interpretan en el sentido de que: "no es posible conocer con precisión arbitraria la posición y el momento de una partícula a un tiempo dado." Pero esto no es correcto, pues hay muchas ocasiones en que esto sí se puede hacer. Como ejemplo, considere el experimento de difracción de electrones al cruzar una sola rendija. Suponga: a) que el momento del haz incidente de electrones está orientado en la dirección Ox (perpendicular a la pantalla) y ha sido determinado con precisión arbitraria; b) que la rendija tiene un ancho δy que puede escogerse tan pequeño como se desee; c) que los electrones difractados viajan en línea recta hasta su detección, con una componente de momento δp_y. Demuestre que $\delta y \delta p_y$ no tiene cota inferior alguna. *Comentario*. Observe que se trata no de una predicción, sino de una retrodicción, inútil para experimentos posteriores, pues la partícula ha sido absorbida. En otras palabras, no se trata de una preparación previa a una medición.

IX. Propiedades dinámicas de los sistemas cuánticos

IX.1. Problemas del texto

IX.1 a) Los operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ anticonmutan si se cumple que $\left\{\hat{A},\hat{B}\right\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$. Muestre que en general puede escribirse el operador producto $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ en la forma $\left\langle \hat{C} \right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle \left\{\hat{A},\hat{B}\right\} \right\rangle + \frac{i}{2}\left\langle -i[\hat{A},\hat{B}] \right\rangle$, y que esto equivale a separar $\left\langle \hat{C} \right\rangle$ en sus partes real e imaginaria y $\hat{C}$ en sus partes hermitiana y antihermitiana, respectivamente.

Un operador arbitrario $\hat{C}$ puede ser escrito como combinación lineal de dos operadores hermitianos en la forma

$$\hat{C} = \frac{\hat{C} + \hat{C}^\dagger}{2} + i\frac{\hat{C} - \hat{C}^\dagger}{2i} \equiv \hat{C}_+ + i\hat{C}_-. \tag{IX.1}$$

Es inmediato que cada uno de los dos operadores $\hat{C}_\pm$ es hermitiano y que $i\hat{C}_-$ es antihermitiano, $(i\hat{C}_-)^\dagger = -i\hat{C}_-$. En el presente caso debemos poner $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$, con lo que se obtiene

$$\hat{C} = \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger}{2} + i\frac{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger}{2i}, \tag{IX.2}$$

que para $\hat{A}$ y $\hat{B}$ hermitianos se reduce a

$$\hat{C} = \frac{1}{2}\{\hat{A},\hat{B}\} + \frac{i}{2}\left([\hat{A},\hat{B}]/i\right). \tag{IX.3}$$

Tomando el valor esperado se obtiene

$$\left\langle \hat{C} \right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle \left\{\hat{A},\hat{B}\right\} \right\rangle + \frac{i}{2}\left\langle -i[\hat{A},\hat{B}] \right\rangle, \tag{IX.4}$$

con lo cual quedan separados el operador arbitrario en dos componentes hermitianas y su valor esperado en parte real e imaginaria.

IX.1 b) Muestre que los operadores $\hat{r}$ y $\hat{p}$ anticonmutan con el operador de paridad, mientras que $\hat{L}$ conmuta con él.

Como se discute en la sección 9.6 del texto, el operador de paridad $\hat{P}$ refleja especularmente las coordenadas, de tal forma que $(\hat{P}x) = -x$, o bien, cuando actúa sobre una función,

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x). \tag{IX.5}$$

De la expresión anterior sigue que

$$x\hat{P}\psi(x) = x\psi(-x) \tag{IX.6}$$

y que

$$\hat{P}(x\psi(x)) = -x\psi(-x). \tag{IX.7}$$

Sumando ambas expresiones se obtiene $\{x, \hat{P}\}\psi(x) = 0$, por lo que, dada la arbitrariedad de $\psi(x)$,

$$\{x, \hat{P}\} = 0, \tag{IX.8}$$

como se solicita demostrar. Reescribiendo este resultado en la forma $\hat{P}x = -x\hat{P}$ y tomando en cuenta que $\hat{P}^2 = \hat{1}$, se obtiene

$$\hat{P}x\hat{P} = -x, \tag{IX.9}$$

que es una forma alterna de (IX.8) y corresponde a la ecuación (T9.75). El significado de este enunciado es directo: en la expresión $\hat{P}x\hat{P}\psi(x)$, la segunda $\hat{P}$ hace el cambio $\psi(x) \to \psi(-x)$, esto se multiplica por x y al resultado se le aplica la primera $\hat{P}$, lo que genera la expresión $-x\psi(x)$, que es precisamente el contenido de la ecuación (IX.9).

Como el operador $\hat{p}$ es proporcional a $\partial/\partial x$, un argumento análogo conduce a que $\hat{P}\hat{p}\hat{P} = -\hat{p}$, es decir,

$$\left\{\hat{p}, \hat{P}\right\} = 0. \tag{IX.10}$$

Por otro lado, la i-ésima componente del operador de momento angular se define de manera análoga a su contraparte clásica (cf. ecuación (T9.72)):[1]

$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk}\hat{x}_j\frac{\partial}{\partial x_k}. \tag{IX.11}$$

Como las variables $\hat{x}_i$ y $\hat{p}_j$ conmutan para $i \neq j$, no hay indeterminación al pasar de la definición clásica a la cuántica. Con esta definición se obtiene, con $\psi(x)$ una función arbitraria,

$$\begin{aligned}[\hat{L}_i, \hat{P}]\psi(x) &= \varepsilon_{ijk}\left(x_j\frac{\partial}{\partial x_k}\psi(-x) - \hat{P}x_j\frac{\partial}{\partial x_k}\psi(x)\right) \\ &= \varepsilon_{ijk}\left(x_j\frac{\partial}{\partial x_k}\psi(-x) - x_j\frac{\partial}{\partial x_k}\psi(-x)\right) = 0. \end{aligned} \tag{IX.12}$$

Dada la arbitrariedad de $\psi(x)$, esto significa que

$$[\hat{L}_i, \hat{P}] = 0. \tag{IX.13}$$

El que los operadores de momento angular y de paridad conmuten indica que las eigenfunciones del operador de momento angular tienen paridad definida. Como $\hat{P}^2\psi(x) = \psi(x)$, de la ecuación de valores propios $\hat{P}\psi(x) = \lambda\psi(x)$ sigue que

[1] La teoría cuántica del momento angular se estudia con detalle en el capítulo 12 del texto.

$\hat{P}^2\psi(x) = \lambda^2\psi(x) = \psi(x)$, es decir, $\lambda^2 = 1$. Por lo tanto, los eigenvalores del operador de paridad son $+1$ (paridad par) o -1 (paridad impar). Concluimos que las eigenfunciones del momento angular son funciones o bien pares, o bien impares de las coordenadas.

Cualquier función $\psi(x)$ puede separarse en sus partes par $\psi_+(x) = \psi_+(-x)$ e impar $\psi_-(x) = -\psi_-(-x)$ escribiéndola en la forma

$$\psi(x) = \tfrac{1}{2}(\psi(x) + \psi(-x)) + \tfrac{1}{2}(\psi(x) - \psi(-x)) \equiv \psi_+(x) + \psi_-(-x)\,. \quad \text{(IX.14)}$$

De aquí sigue que

$$\psi_+(x) = \tfrac{1}{2}(\psi(x) + \psi(-x)) = \tfrac{1}{2}(\mathbb{I} + \hat{P})\psi(x)\,; \quad \text{(IX.15)}$$

$$\psi_-(x) = \tfrac{1}{2}(\psi(x) - \psi(-x)) = \tfrac{1}{2}(\mathbb{I} - \hat{P})\psi(x)\,. \quad \text{(IX.16)}$$

Estas expresiones exhiben a los operadores

$$\hat{P}_\pm \equiv \tfrac{1}{2}(\mathbb{I} \pm \hat{P}) \quad \text{(IX.17)}$$

como los proyectores de estados con paridad $\pm$, respectivamente.

Consideremos el caso en que $\hat{P}$ conmuta con el hamiltoniano. Bajo estas condiciones podemos escribir

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_\pm &= \tfrac{1}{2}(\hat{H} \pm \hat{H}\hat{P})\psi = \tfrac{1}{2}(\hat{H} \pm \hat{P}\hat{H})\psi = \tfrac{1}{2}(\mathbb{I} \pm \hat{P})\hat{H}\psi \\ &= \tfrac{1}{2}(\mathbb{I} \pm \hat{P})i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tfrac{1}{2}(\mathbb{I} \pm \hat{P})\psi = i\hbar\frac{\partial\psi_\pm}{\partial t}. \end{aligned} \quad \text{(IX.18)}$$

Este resultado muestra que si ψ satisface la ecuación de Schrödinger, cada una de sus partes con paridad definida también la satisfacen por separado y no se mezclan durante la evolución inducida por el hamiltoniano. En otras palabras, la paridad inicial de la función de onda se conserva durante la evolución generada por hamiltonianos que conmutan con el operador de paridad.

IX.2 Demuestre que los paréntesis de Poisson cumplen las siguientes reglas y compare con las propiedades de los conmutadores. ¿Puede hablarse de una propiedad de derivación de los paréntesis de Poisson?

$$\begin{gathered} [u,v]_{\text{clás}} = -[v,u]_{\text{clás}}\,; \\ [u+v,w]_{\text{clás}} = [u,w]_{\text{clás}} + [v,w]_{\text{clás}}\,; \\ [uw,v]_{\text{clás}} = u\,[w,v]_{\text{clás}} + [u,v]_{\text{clás}}\,w; \\ [u,[v,w]_{\text{clás}}]_{\text{clás}} + [v,[w,u]_{\text{clás}}]_{\text{clás}} + [w,[u,v]_{\text{clás}}]_{\text{clás}} = 0. \end{gathered}$$

La última expresión es la *identidad de Jacobi*.

De la definición de los paréntesis de Poisson sigue de inmediato que

$$[u,v]_{\text{clás}} = \sum_i \left[\frac{\partial u}{\partial q_i}\frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i}\frac{\partial v}{\partial q_i}\right] = -\sum_i \left[\frac{\partial v}{\partial q_i}\frac{\partial u}{\partial p_i} - \frac{\partial v}{\partial p_i}\frac{\partial u}{\partial q_i}\right], \quad \text{(IX.19)}$$

es decir,

$$[u,v]_{\text{clás}} = -[v,u]_{\text{clás}}\,. \quad \text{(IX.20)}$$

Análogamente,

$$[u+v,w]_{\text{clás}} = \sum_i \left[\frac{\partial\,(u+v)}{\partial q_i}\frac{\partial w}{\partial p_i} - \frac{\partial\,(u+v)}{\partial p_i}\frac{\partial w}{\partial q_i} \right],$$

de donde sigue que

$$[u+v,w]_{\text{clás}} = [u,w]_{\text{clás}} + [v,w]_{\text{clás}}\,. \tag{IX.21}$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned} [uw,v]_{\text{clás}} &= \sum_i \left[\frac{\partial\,(uw)}{\partial q_i}\frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial\,(uw)}{\partial p_i}\frac{\partial v}{\partial q_i} \right] \\ &= \sum_i u \left[\frac{\partial w}{\partial q_i}\frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial w}{\partial p_i}\frac{\partial v}{\partial q_i} \right] + \sum_i \left[\frac{\partial u}{\partial q_i}\frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i}\frac{\partial v}{\partial q_i} \right] w, \end{aligned}$$

es decir,

$$[uw,v]_{\text{clás}} = u\,[w,v]_{\text{clás}} + [u,v]_{\text{clás}}\,w. \tag{IX.22}$$

Los resultados anteriores pueden combinarse para escribir

$$\begin{aligned} [u,[v,w]_{\text{clás}}]_{\text{clás}} &= [u,vw-wv]_{\text{clás}} = [u,vw]_{\text{clás}} - [u,wv]_{\text{clás}} \\ &= v\,[u,w]_{\text{clás}} + [u,v]_{\text{clás}}\,w - w\,[u,v]_{\text{clás}} - [u,w]_{\text{clás}}\,v \\ &= [v,[u,w]_{\text{clás}}]_{\text{clás}} + [[u,v]_{\text{clás}}\,,w]_{\text{clás}}\,, \end{aligned}$$

expresión que conduce de inmediato a la identidad de Jacobi:

$$[u,[v,w]_{\text{clás}}]_{\text{clás}} + [v,[w,u]_{\text{clás}}]_{\text{clás}} + [w,[u,v]_{\text{clás}}]_{\text{clás}} = 0. \tag{IX.23}$$

Es claro que podemos hablar de una propiedad de derivación de los paréntesis de Poisson en el mismo sentido y con similares restricciones en que se habló de ella en el problema VIII.5 (y en el problema ilustrativo 8.4 del texto), en conexión con el operador de conmutación.

IX.3 Demuestre que si dos operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan con $\hat{C}$, donde $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=i\hat{C}$, se cumple que $\left[\hat{A},f(\hat{B})\right] = \left[\hat{A},\hat{B}\right] f'(\hat{B})$, para f una función arbitraria.

Supondremos que $f(\hat{B})$ puede desarrollarse en serie de potencias del operador $\hat{B}$:

$$f(\hat{B}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{B}^n. \tag{IX.24}$$

De aquí sigue que

$$\left[\hat{A},f(\hat{B})\right] = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left[\hat{A},\hat{B}^n\right]. \tag{IX.25}$$

Como por hipótesis $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan con su conmutador, el resultado (VIII.29) del problema VIII.5 permite escribir

$$\left[\hat{A},\hat{B}^n\right] = n\hat{B}^{n-1}\left[\hat{A},\hat{B}\right], \tag{IX.26}$$

con lo que obtenemos

$$\left[\hat{A}, f(\hat{B})\right] = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n \hat{B}^{n-1} \left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right] f'(\hat{B}), \tag{IX.27}$$

que es el resultado solicitado.

Para el caso particular, pero muy importante, en que $\hat{A} = x$, $\hat{B} = \hat{p}$, se obtiene

$$[x, f(\hat{p})] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial \hat{p}}, \tag{IX.28}$$

mientras que para $\hat{A} = \hat{p}$ y $\hat{B} = \hat{x}$, se obtiene

$$[\hat{p}, f(\hat{x})] = \frac{\partial f}{\partial x} [\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}, \tag{IX.29}$$

resultados que corresponden a las ecuaciones (T9.34).

IX.4 Demuestre que para dos operadores arbitrarios $\hat{f}$ y $\hat{g}$ se cumple $e^{\hat{f}\hat{g}}\hat{f} = \hat{f}e^{\hat{g}\hat{f}}$.

La función exponencial que tiene como argumento a un operador se define a través de su serie de potencias

$$e^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\hat{A}\right)^n. \tag{IX.30}$$

Usando esta definición podemos escribir

$$\begin{aligned} e^{\hat{f}\hat{g}}\hat{f} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\hat{f}\hat{g}\right)^n \hat{f} = \hat{f} + \hat{f}\hat{g}\hat{f} + \frac{1}{2!}\hat{f}\hat{g}\hat{f}\hat{g}\hat{f} + \frac{1}{3!}\hat{f}\hat{g}\hat{f}\hat{g}\hat{f}\hat{g}\hat{f} + \cdots \\ &= \hat{f}\left[1 + \hat{g}\hat{f} + \frac{1}{2!}\hat{g}\hat{f}\hat{g}\hat{f} + \frac{1}{3!}\hat{g}\hat{f}\hat{g}\hat{f}\hat{g}\hat{f} + \cdots\right] \\ &= \hat{f}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\hat{g}\hat{f}\right)^n = \hat{f}e^{\hat{g}\hat{f}}, \end{aligned} \tag{IX.31}$$

que es el resultado solicitado.

IX.5 Calcule $d\left\langle \hat{T} \right\rangle / dt$ ($\hat{T}$ representa el operador de energía cinética) para un sistema cuántico conservativo y discuta el resultado.

La ecuación de Heisenberg (T9.20) aplicada al operador de energía cinética da

$$\frac{d\left\langle \hat{T} \right\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left\langle [\hat{T}, \hat{H}] \right\rangle. \tag{IX.32}$$

Consideraremos que el hamiltoniano tiene la forma $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ y, como el sistema es conservativo, que la fuerza aplicada es $\mathbf{F} = -\boldsymbol{\nabla} V$. Tenemos entonces

$$\begin{aligned} \left[\hat{T}, \hat{H}\right] &= \left[\hat{T}, V\right] = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, V\right] = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{2m} \cdot [\hat{\mathbf{p}}, V] + [\hat{\mathbf{p}}, V] \cdot \frac{\hat{\mathbf{p}}}{2m} \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \left((\hat{\mathbf{p}} \cdot \nabla V) + (\nabla V) \cdot \hat{\mathbf{p}}\right) = \frac{i\hbar}{2} \left(\hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{F}} + \hat{\mathbf{F}} \cdot \hat{\mathbf{v}}\right), \end{aligned} \tag{IX.33}$$

donde se ha puesto $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{p}}/m$. Combinando las expresiones (IX.32) y (IX.33), queda

$$\frac{d\left\langle \hat{T} \right\rangle}{dt} = \tfrac{1}{2}\left\langle \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{F}} + \hat{\mathbf{F}} \cdot \hat{\mathbf{v}} \right\rangle . \tag{IX.34}$$

Este resultado es analógo a la correspondiente expresión clásica que establece que la rapidez de cambio de la energía cinética es igual al trabajo realizado sobre el sistema por unidad de tiempo. A diferencia del caso clásico, aquí aparece el anticonmutador de $\hat{\mathbf{v}}$ y $\hat{\mathbf{F}}$, además de tratarse de un valor esperado. La combinación simétrica dada por el anticonmutador es una generalización cuántica que aparece de manera muy frecuente asociada a parejas de operadores que no conmutan (como $\hat{p}$ y $\hat{F}(x)$), pues ella da lugar a operadores hermitianos y valores esperados reales, como sabemos.

IX.6 Generalice el teorema de Ehrenfest para el caso en que existe un campo magnético externo.[2]

El hamiltoniano de una partícula cuántica en presencia de un campo electromagnético se escribe en términos del potencial vectorial $\mathbf{A}$ y del potencial escalar ϕ, precisamente en la forma del correspondiente hamiltoniano clásico con acoplamiento minimal, es decir,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + e\phi, \tag{IX.35}$$

con el campo eléctrico y magnético dados, como es usual, por

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla\phi, \qquad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \tag{IX.36}$$

Como $\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}\psi = \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}\psi - i\hbar(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{A})\psi$, el hamiltoniano anterior se puede escribir en la forma equivalente

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}\left(\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}\right) + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + e\phi \\ &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e}{mc}\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{ie\hbar}{2mc}\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + e\phi. \end{aligned} \tag{IX.37}$$

Para establecer el resultado solicitado se puede seguir el procedimiento utilizado en la sección 9.3 del texto, usando como punto de partida la ecuación de Heisenberg

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}\left[\hat{f}, \hat{H}\right] \tag{IX.38}$$

aplicada a los operadores de posición y momento. Para aplicarla a $\hat{x}_i$ necesitamos calcular el conmutador

$$\begin{aligned} \left[\hat{x}_i, \hat{H}\right] &= \frac{1}{2m}\left[\hat{x}_i, \hat{\mathbf{p}}^2\right] - \frac{e}{mc}\left[\hat{x}_i, \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right] \\ &= i\hbar\frac{\hat{p}_i}{m} - \frac{i\hbar e}{mc}A_i. \end{aligned} \tag{IX.39}$$

[2]En caso necesario puede consultarse la sección 13.5 del texto, donde se muestra cómo se debe introducir el campo magnético en la teoría de Schrödinger.

De aquí y la ecuación (IX.38) sigue que

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt} = \frac{1}{m}\left(\hat{p}_i - \frac{e}{c}A_i\right). \tag{IX.40}$$

En notación vectorial este resultado se escribe en la forma

$$\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{1}{m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right). \tag{IX.41}$$

Repitiendo el procedimiento obtenemos

$$\frac{d^2\hat{x}_i}{dt^2} = \frac{1}{m}\frac{d\hat{p}_i}{dt} - \frac{e}{mc}\frac{dA_i}{dt} = -\frac{i}{m\hbar}\left[\hat{p}_i, \hat{H}\right] - \frac{e}{mc}\frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{ie}{mc\hbar}\left[A_i, \hat{H}\right]. \tag{IX.42}$$

Realizando el cálculo de estos conmutadores se llega a (véase ejercicio IX.26)

$$\begin{aligned} m\frac{d^2\hat{\mathbf{r}}}{dt^2} &= -\frac{e}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - e\nabla\phi \\ &\quad + \frac{e}{2mc}\left[\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\times(\nabla\times\mathbf{A}) - (\nabla\times\mathbf{A})\times\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right]. \end{aligned}$$

Introduciendo aquí la expresión (IX.36) para $\mathbf{E}$ y $\mathbf{B}$ en términos de los potenciales y la ecuación (IX.41), se obtiene

$$m\frac{d^2\hat{\mathbf{r}}}{dt^2} = e\mathbf{E} + \frac{e}{2c}\left(\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt}\times\mathbf{B} - \mathbf{B}\times\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt}\right). \tag{IX.43}$$

Este resultado muestra que la expresión cuántica para la fuerza de Lorentz es

$$\hat{\mathbf{F}}_{\text{Lorentz}} = e\mathbf{E} + \frac{e}{2c}\left(\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt}\times\mathbf{B} - \mathbf{B}\times\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt}\right), \tag{IX.44}$$

que es la generalización natural de la correspondiente expresión clásica (considérese que para $\hat{\mathbf{B}}$ independiente de x se tiene $\hat{\mathbf{v}}\times\mathbf{B} = -\mathbf{B}\times\hat{\mathbf{v}}$; en el caso general aparece un término sin análogo clásico que proviene del hecho de que $\hat{\mathbf{p}}\times\mathbf{B} = -\mathbf{B}\times\hat{\mathbf{p}} - i\hbar(\nabla\times\mathbf{B})$).

IX.7 En un problema dado se cambia la descripción del campo electromagnético mediante una transformación de norma realizada con una función arbitraria χ:

$$\mathbf{A} \to \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi; \qquad \Phi \to \Phi' = \Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}.$$

Sean ψ y ψ' las funciones de onda que resuelven la correspondiente ecuación de Schrödinger para $(\mathbf{A}, \Phi)$ y $(\mathbf{A}', \Phi')$, respectivamente. Encuentre la relación entre ψ y ψ' y demuestre que el valor esperado de las variables $\hat{\mathbf{x}}$ y $\hat{\mathbf{p}} - (e/c)\,\mathbf{A}$ no se altera con el cambio de descripción. Discuta los resultados.

Como se recordará, las ecuaciones de Maxwell son invariantes frente a la transformación de norma (local) definida por las ecuaciones

$$\mathbf{A} \to \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi; \qquad \Phi \to \Phi' = \Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}. \tag{IX.45}$$

Esto significa que, desde el punto de vista del campo electromagnético, el sistema original y el transformado son el mismo. (También significa que el conjunto

de las 4 variables $\mathbf{A}$ y Φ para la descripción del campo electromagnético es redundante.) Es importante entonces demostrar que las predicciones de la teoría de Schrödinger tampoco se ven afectadas por la transformación de norma anterior. Para ello consideremos el sistema original y el transformado, cuyas ecuaciones de Schrödinger se obtienen del hamiltoniano (IX.35), al que por generalidad se le agrega un potencial no electromagnético:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi + (V + e\Phi)\,\psi, \tag{IX.46}$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}'\right)^2\psi' + \left(V + e\Phi'\right)\psi'. \tag{IX.47}$$

Introducimos en la última ecuación las relaciones (IX.45), lo que da

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} + \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi' = -\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi\right)^2\psi' + (V + e\Phi)\,\psi'. \tag{IX.48}$$

El término adicional en el miembro izquierdo puede ser eliminado con la transformación $\psi' = \psi e^{i\Lambda}$, que da

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} + \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi' = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}e^{i\Lambda} - \hbar\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\psi' + \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi'. \tag{IX.49}$$

Con la selección

$$\Lambda = \frac{e}{\hbar c}\chi \tag{IX.50}$$

(IX.49) se reduce a

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} + \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi' = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}e^{i\Lambda}. \tag{IX.51}$$

Tomamos entonces $\psi' = \psi e^{i\Lambda(\mathbf{r},t)}$ para estudiar el miembro de la derecha:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi\right)^2\psi e^{i\Lambda} &= \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi\right) \\
&\quad\cdot\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi\right)\psi e^{i\Lambda} \\
&= \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi\right) \\
&\quad\cdot\left[e^{i\Lambda}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi + \hbar\nabla\Lambda\right)\psi\right] \\
&= \frac{1}{2m}e^{i\Lambda}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi + \hbar\nabla\Lambda\right) \\
&\quad\cdot\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi + \hbar\nabla\Lambda\right)\psi \\
&= \frac{1}{2m}e^{i\Lambda}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi + \hbar\nabla\Lambda\right)^2\psi \\
&= \frac{1}{2m}e^{i\Lambda}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi,
\end{aligned} \tag{IX.52}$$

donde se usó (IX.50). Sustituyendo (IX.51) y (IX.52) en (IX.48), esta última se reduce, al eliminar el factor exponencial común, a la ecuación original de Schrödinger (IX.46). Esto muestra que la transformación de norma mantiene invariantes las predicciones de la mecánica cuántica si se le completa con la regla de transformación

$$\psi' = \psi e^{i(e/\hbar c)\chi(\mathbf{r},t)}. \tag{IX.53}$$

En el sistema transformado el valor esperado de una función de la posición x cualquiera es

$$\left\langle \psi' \right| F(x) \left| \psi' \right\rangle = \langle \psi | \, e^{-i(e/\hbar c)\chi(x,t)} F(x) e^{i(e/\hbar c)\chi(x,t)} \, |\psi\rangle = \langle \psi | \, F(x) \, |\psi\rangle \,, \quad \text{(IX.54)}$$

que muestra explícitamente su invariancia. El cálculo del valor esperado del momento canónico en el sistema transformado es una variante del cálculo anterior, y da:

$$\begin{aligned} \left\langle \psi' \right| \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}' \left| \psi' \right\rangle &= \left\langle \psi' \right| \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi \left| \psi' \right\rangle \\ &= \langle \psi | \, e^{-i(e/\hbar c)\chi(x,t)} (\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi) e^{i(e/\hbar c)\chi(x,t)} \, |\psi\rangle \\ &= \langle \psi | \, (\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi + \frac{e}{c}\nabla\chi) \, |\psi\rangle = \langle \psi | \, (\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}) \, |\psi\rangle \,. \end{aligned} \quad \text{(IX.55)}$$

En el problema IX.28 se estudian otros puntos relacionados con este tema.[3]

IX.8 Demuestre explícitamente las ecuaciones (T9.33) y (T9.34).

Como se señala en el texto (al pie de la página 238), la ecuación (T9.33)

$$\left[x_i, \hat{p}_j^n \right] = i\hbar n \hat{p}_j^{n-1} \delta_{ij} \quad \text{(IX.56)}$$

puede ser demostrada inductivamente por una aplicación repetida de la regla de conmutación $[x_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$. Es aún más simple obtener el resultado solicitado a partir de la ecuación (VIII.29),

$$[\hat{u}, \hat{v}^n] = n\hat{v}^{n-1} \, [\hat{u}, \hat{v}] \,, \quad \text{(IX.57)}$$

válida cuando $[[\hat{u}, \hat{v}] \,, \hat{u}] = 0$. Como en efecto se cumple $[[x_i, \hat{p}_j], x_i] = 0$, podemos escribir

$$\left[x_i, \hat{p}_j^n \right] = n\hat{p}_j^{n-1} \, [x_i, \hat{p}_j] = i\hbar n \hat{p}_j^{n-1} \delta_{ij}, \quad \text{(IX.58)}$$

que es el resultado buscado.

Consideremos de manera más general una función $f(\hat{p})$ que puede ser desarrollada en serie de potencias de $\hat{p}_j$:

$$f\left(\hat{p}_j\right) = \sum_{j,n} a_n \hat{p}_j^n. \quad \text{(IX.59)}$$

Usando el resultado anterior escribimos

$$[\hat{x}_i, f(\hat{p}_j)] = \sum_{j,n} a_n \left[\hat{x}_i, \hat{p}_j^n \right] = i\hbar\delta_{ij} \sum_{j,n} n a_n \hat{p}_j^{n-1} = i\hbar \frac{\partial f(\hat{p}_i)}{\partial p_i} \delta_{ij}. \quad \text{(IX.60)}$$

De forma análoga, si $f(x)$ es una función arbitraria que se desarrolla en serie de potencias, se obtiene

$$[\hat{p}_i, f(x_j)] = \sum_{j,n} b_n \left[\hat{p}_i, x_j^n \right] = -i\hbar\delta_{ij} \sum_{j,n} b_n n x_j^{n-1} = -i\hbar\delta_{ij} \frac{\partial f\left(x_j\right)}{\partial x_j}. \quad \text{(IX.61)}$$

Las dos últimas ecuaciones corresponden a las ecuaciones (T9.34) solicitadas.

[3] En el artículo de D.H. Kobe *Am. J. Phys.* **46** (1978) 342 se estudia el problema inverso, o sea que a partir del requerimiento de invariancia de norma local de la función de onda se recuperan las ecuaciones de Maxwell.

IX.9 Demuestre que el espectro de un operador es invariante respecto a una transformación unitaria.

La demostración directa es la siguiente. Sea $\hat{U}$ el operador unitario con que se realiza la transformación. Aplicando $\hat{U}$ a la ecuación de eigenvalores $\hat{F}\left|n\right\rangle = f_n\left|n\right\rangle$ y transformando, se obtiene sucesivamente

$$\hat{U}\hat{F}\left|n\right\rangle = \hat{U}\hat{F}\hat{U}^{\dagger}\hat{U}\left|n\right\rangle = \hat{F}'\left|n'\right\rangle = f_n\hat{U}\left|n\right\rangle = f_n\left|n'\right\rangle,$$

en donde se escribió $\hat{F}' = \hat{U}\hat{F}\hat{U}^{\dagger}$, $\left|n'\right\rangle = \hat{U}\left|n\right\rangle$. Comparando con la ecuación transformada de valores propios,

$$\hat{F}'\left|n'\right\rangle = f'_n\left|n'\right\rangle, \tag{IX.62}$$

sigue de inmediato que $f'_n = f_n$.

Una demostración equivalente se obtiene expresando el operador $\hat{F}$ en su propia representación,

$$\hat{F} = \sum_n f_n\left|n\right\rangle\left\langle n\right|, \tag{IX.63}$$

donde f_n son los valores propios de $\hat{F}$, y $\left|n\right\rangle$ el correspondiente eigenvector. Aplicando $\hat{U}^{\dagger}$ por la derecha y $\hat{U}$ por la izquierda al desarrollo anterior, obtenemos

$$\hat{U}\hat{F}\hat{U}^{\dagger} = \sum_n f_n\hat{U}\left|n\right\rangle\left\langle n\right|\hat{U}^{\dagger} = \sum_n f_n\left|n'\right\rangle\left\langle n'\right|, \tag{IX.64}$$

es decir,

$$\hat{F}' = \sum_n f_n\left|n'\right\rangle\left\langle n'\right|. \tag{IX.65}$$

El nuevo operador queda representado en la nueva base con los mismos valores propios que el operador no transformado, ecuación (IX.63), confirmando que el espectro de un operador no cambia cuando se realiza una transformación unitaria.

IX.10 Obtenga la ecuación de movimiento de $\hat{F}_H$ directamente a partir de la ecuación (T9.55).

La ecuación (T9.55) establece que si $\hat{F} \equiv \hat{F}_S$ representa un operador en la descripción de Schrödinger, su expresión en la descripción de Heisenberg es

$$\hat{F}_H(t) = \hat{S}^{\dagger}\hat{F}_S\hat{S} = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}_S e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \tag{IX.66}$$

en donde $\hat{S} = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ es el operador de evolución (para el caso en que el hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo). Derivando respecto del tiempo y suponiendo que $\hat{F}_S$ tampoco depende explícitamente del tiempo, obtenemos

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{d\hat{S}^{\dagger}}{dt}\hat{F}_S\hat{S} + \hat{S}^{\dagger}\hat{F}_S\frac{d\hat{S}}{dt}. \tag{IX.67}$$

Como $\hat{H}$ conmuta con $\hat{S}$ y $\hat{S}^{\dagger}$, podemos escribir

$$\frac{d\hat{S}^{\dagger}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{S}^{\dagger}, \quad \frac{d\hat{S}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\hat{S}\hat{H}, \tag{IX.68}$$

con lo que la expresión anterior toma la forma

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{S}^\dagger\hat{F}_S\hat{S} - \hat{S}^\dagger\hat{F}_S\hat{S}\hat{H}\right) = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{F}_H - \hat{F}_H\hat{H}\right), \tag{IX.69}$$

es decir,

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{F}_H, \hat{H}\right], \tag{IX.70}$$

que es la ecuación de movimiento pedida, ecuación (T9.56).

IX.11 Derive las ecuaciones de movimiento en la descripción de Schrödinger a partir de las ecuaciones de movimiento de Heisenberg.

La ecuación de movimiento de Heisenberg para $\hat{F}$ y $\hat{H}$ independientes del tiempo es la ecuación (IX.70). Multiplicando por la derecha con el vector de estado inicial $|0\rangle$ se obtiene, usando la ecuación (IX.66) y el hecho de que $\hat{S}$ y $\hat{H}$ conmutan,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d\hat{F}_H}{dt}|0\rangle &= \left[\hat{F}_H, \hat{H}\right]|0\rangle = \left[\hat{S}^\dagger\hat{F}\hat{S}\hat{H} - \hat{H}\hat{S}^\dagger\hat{F}\hat{S}\right]|0\rangle \\ &= \left[\hat{S}^\dagger\hat{F}\hat{H} - \hat{H}\hat{S}^\dagger\hat{F}\right]\hat{S}|0\rangle = \left[\hat{S}^\dagger\hat{F}\hat{H} - \hat{H}\hat{S}^\dagger\hat{F}\right]|t\rangle, \end{aligned} \tag{IX.71}$$

donde $|t\rangle = \hat{S}|0\rangle$ es el vector de estado al tiempo t. Por otra parte,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d\hat{F}_H}{dt}|0\rangle &= i\hbar\frac{d}{dt}\hat{S}^\dagger\hat{F}\hat{S}|0\rangle = i\hbar\frac{d\hat{S}^\dagger}{dt}\hat{F}\hat{S}|0\rangle + i\hbar\hat{S}^\dagger\frac{d}{dt}\hat{F}\hat{S}|0\rangle \\ &= i\hbar\frac{d\hat{S}^\dagger}{dt}\hat{F}|t\rangle + i\hbar\hat{S}^\dagger\frac{d}{dt}\hat{F}|t\rangle = -\hat{H}\hat{S}^\dagger\hat{F}|t\rangle + i\hbar\hat{S}^\dagger\frac{d}{dt}\hat{F}|t\rangle. \end{aligned} \tag{IX.72}$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación anterior y reduciendo términos iguales queda ($\hat{F}$ es independiente del tiempo)

$$i\hbar\hat{S}^\dagger\frac{d}{dt}\hat{F}|t\rangle = i\hbar\hat{S}^\dagger\hat{F}\frac{d|t\rangle}{dt} = \hat{S}^\dagger\hat{F}\hat{H}|t\rangle. \tag{IX.73}$$

Multiplicando por la izquierda por $\hat{S}$ y considerando que $\hat{F}$ es un operador arbitrario se obtiene la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\frac{d|t\rangle}{dt} = \hat{H}|t\rangle. \tag{IX.74}$$

Hemos pasado así a la descripción en que la evolución del sistema se atribuye a la de los vectores de estado, con observables independientes del tiempo. Naturalmente, la ecuación anterior se complementa con su adjunta para describir la evolución de los bras.

IX.12 Deduzca detalladamente la ecuación (3) del problema ilustrativo 9.1 del texto.

La versión cuántica del teorema del virial en su forma simple usual establece que (cf. ecuación (2) del problema ilustrativo 9.1 del texto)

$$\left\langle\hat{T}\right\rangle = \tfrac{1}{2}\langle\mathbf{r}\cdot\nabla V\rangle. \tag{IX.75}$$

Para un potencial central se cumple que $\mathbf{r}\cdot\nabla V = r(\partial V/\partial r)$, por lo que, para el caso particular $V = ar^n$ que se solicita estudiar, se obtiene

$$\left\langle \hat{T} \right\rangle = \tfrac{1}{2} na \left\langle r^n \right\rangle = \frac{n}{2} \left\langle V \right\rangle . \tag{IX.76}$$

Este resultado nos permite escribir la energía media en la forma

$$\left\langle E \right\rangle = \left\langle \hat{T} \right\rangle + \left\langle V \right\rangle = (\frac{n}{2} + 1) \left\langle V \right\rangle = \frac{n+2}{2} \left\langle V \right\rangle , \tag{IX.77}$$

con lo cual se obtiene

$$\left\langle V \right\rangle = \frac{2}{n+2} \left\langle E \right\rangle , \tag{IX.78}$$

y

$$\left\langle \hat{T} \right\rangle = \frac{n}{n+2} \left\langle E \right\rangle , \tag{IX.79}$$

que es lo que se nos pedía demostrar.

Estos resultados pierden sentido cuando $n = -2$; como se discute en el problema ilustrativo 9.2 del texto; simplemente sucede que en este caso, y más en general para $n < -2$, no hay estados ligados, como se supuso en la derivación de la ecuación (IX.76). Por lo tanto, las expresiones anteriores son aplicables para $n > -2$.

IX.13 Deduzca detalladamente las ecuaciones (3) y (4) del problema ilustrativo 9.6 del texto.

Se nos pide derivar las desigualdades de Heisenberg para $\hat{x}(t)$ y $\hat{p}(t)$ calculadas para tiempos diferentes. Supondremos que el hamiltoniano no depende del tiempo. Usando la descripción de Heisenberg escribimos, con ayuda de la ecuación (IX.66),

$$\hat{x}\left(t+\delta t\right) = e^{i\hat{H}\delta t/\hbar}\hat{x}\left(t\right)e^{-i\hat{H}\delta t/\hbar,} \tag{IX.80}$$

y desarrollamos en serie de Taylor,

$$\hat{x}\left(t+\delta t\right) = \hat{x}\left(t\right) + i\frac{\delta t}{\hbar}[\hat{H},\hat{x}] + \frac{1}{2!}\left(i\frac{\delta t}{\hbar}\right)^2\left[\hat{H},[\hat{H},\hat{x}]\right] + \cdots \tag{IX.81}$$

Como

$$[\hat{x},\hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p} \quad \text{y} \quad [\hat{p},\hat{H}] = -i\hbar V',$$

se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{x}\left(t+\delta t\right) &= \hat{x}\left(t\right) + \frac{\delta t}{m}\hat{p}\left(t\right) + \frac{1}{2!}\left(\frac{\delta t}{\hbar}\right)^2\frac{i\hbar}{m}\left[\hat{H},\hat{p}\right] + \cdots \\ &= \hat{x}\left(t\right) + \frac{\delta t}{m}\hat{p}\left(t\right) - \frac{1}{2m}\left(\delta t\right)^2 V' + \cdots \end{aligned} \tag{IX.82}$$

De esta expresión sigue de inmediato que

$$[\hat{x}\left(t\right),\hat{x}\left(t+\delta t\right)] = \frac{\delta t}{m}\left[\hat{x}\left(t\right),\hat{p}\left(t\right)\right] + \cdots = i\hbar\frac{\delta t}{m} + \cdots , \tag{IX.83}$$

donde los términos omitidos son todos de orden superior en δt. Tomando $\delta t = 0$ en esta expresión se recupera la relación de conmutación usual; en otras palabras, el conmutador de funciones de $\hat{x}$, $[f(\hat{x}\left(t\right)), g(\hat{x}\left(t'\right))]$, se anula sólo para tiempos

iguales, pero no necesariamente para tiempos diferentes, debido a la evolución del sistema.

Aplicaremos al conmutador recién obtenido la ecuación (T8.70), que establece que el producto de las dispersiones de dos operadores hermitianos satisface la desigualdad de Heisenberg,

$$\left\langle \left(\Delta\hat{A}\right)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta\hat{B})^2 \right\rangle \geq \tfrac{1}{4} \left| \left\langle \hat{C} \right\rangle \right|^2, \tag{IX.84}$$

donde $\hat{C}$ está dada por $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$. Combinando (IX.83) y (IX.84) se obtiene

$$\left\langle (\Delta\hat{x}\,(t))^2 \right\rangle \left\langle (\Delta\hat{x}\,(t+\delta t))^2 \right\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4m^2} (\delta t)^2 + \cdots, \tag{IX.85}$$

o bien, en términos de las correspondientes desviaciones estándar, $\left\langle (\Delta\hat{x}\,(t))^2 \right\rangle^{1/2} \equiv \Delta x\,(t)$, etc.,

$$\Delta x\,(t)\,\Delta x\,(t+\delta t) \geq \frac{\hbar}{2m} |\delta t| + \cdots \tag{IX.86}$$

En forma análoga se obtiene

$$\hat{p}\,(t+\delta t) = \hat{p}\,(t) - V'\delta t - \frac{(\delta t)^2}{4m} \left(\hat{p}\,(t)\,V'' + V''\hat{p}\,(t)\right) + \cdots, \tag{IX.87}$$

de donde sigue que

$$[\hat{p}(t), \hat{p}(t+\delta t)] = -\left[\hat{p}(t), V'\delta t\right] - \frac{(\delta t)^2}{4m} \left[\hat{p}(t), \hat{p}(t)V'' + V''\hat{p}(t)\right] + \cdots \tag{IX.88}$$

Insertando aquí la expresión

$$\left[\hat{p}\,(t)\,, V'\right] = -i\hbar V'', \tag{IX.89}$$

queda finalmente

$$[\hat{p}\,(t)\,, \hat{p}\,(t+\delta t)] = i\hbar V''\delta t + \cdots \tag{IX.90}$$

La correspondiente desigualdad de Heisenberg para las desviaciones estándar es

$$\Delta p\,(t)\,\Delta p\,(t+\delta t) \geq \frac{\hbar}{2} \left|\left\langle V''\,(x\,(t))\right\rangle\right| \delta t + \cdots \tag{IX.91}$$

Las ecuaciones (IX.83), (IX.86), (IX.90) y (IX.91) son los resultados solicitados.

IX.14 Calcule $\left[\hat{H}\,(t)\,, \hat{H}\,(t')\right]$ y $\Delta H\,(t)\,\Delta H\,(t')$ para los siguientes casos:

a) oscilador armónico, para $t' - t$ arbitraria;

b) un potencial general, para $t' - t$ pequeña.

Es posible hacer el cálculo solicitado de manera explícita; sin embargo, se puede llegar al resultado final sin hacer ningún cálculo observando que en ambos casos el hamiltoniano se conserva, por lo que los eigenestados de $H(t)$ y $H(t')$ son comunes, y ambos operadores deben conmutar. Con esto, las desigualdades de Heisenberg aplicadas a ellos son triviales. Éste no sería el caso si el potencial dependiera del tiempo.

IX.15 Una caja de lado L contiene una partícula en su estado base; repentinamente se separan las paredes de la caja a la distancia kL, $1 < k < \infty$. Calcule la probabilidad de que la partícula ocupe el estado base en la nueva caja y determine el estado en que es más probable que quede la partícula. Discuta los resultados como función de k. ¿Qué hubiera pasado si el tamaño de la caja cambia muy lentamente?

Consideremos que las paredes impenetrables de la caja están colocadas en $x = 0$ y $x = L$, y que la partícula se encuentra inicialmente en su estado base, que denotaremos con $\chi_0(x)$. Como la pared colocada originalmente en $x = L$ se desplaza repentinamente a la posición $x = kL$, para todo momento posterior $t > 0$ las eigenfunciones del nuevo sistema (que denotaremos con $\varphi_n(x)$) son las soluciones estacionarias para un potencial cuadrado infinito de anchura kL.

El estado alcanzado en la nueva caja para $t > 0$ se puede expresar en la forma

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n \varphi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar}, \tag{IX.92}$$

con c_n las amplitudes que determinan la probabilidad que el eigenestado $\varphi_n(x)$ tiene en la nueva situación; estos coeficientes se determinan a partir de la condición inicial. Como el desplazamiento de la pared se supone instantáneo, la función de onda no puede cambiar durante ese movimiento, por lo que para $t = 0$ debemos poner

$$\psi(x,0) = \chi_0(x). \tag{IX.93}$$

De (IX.92) y (IX.93) sigue que

$$\chi_0(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x). \tag{IX.94}$$

Multiplicando esta expresión por $\varphi_m^*(x)$, integrando sobre todo el espacio y utilizando la ortogonalidad de las eigenfunciones $\varphi_n(x)$, se obtiene

$$c_m = \int \varphi_m^*(x)\, \chi_0(x)\, dx. \tag{IX.95}$$

La probabilidad de que después del cambio la partícula ocupe el estado φ_n es

$$P_n = |c_n|^2 = \left| \int \varphi_n^*(x)\, \chi_0(x)\, dx \right|^2. \tag{IX.96}$$

Las eigenfunciones $\chi_0(x)$ y $\varphi_n(x)$ son las del correspondiente pozo infinito dadas por la ecuación (T3.31)

$$\chi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \frac{\pi x}{L}, \quad \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{kL}} \operatorname{sen} \frac{\pi x}{kL}. \tag{IX.97}$$

De aquí y (IX.95) sigue que

$$c_n = \frac{2}{L\sqrt{k}} \int_0^L \operatorname{sen} \frac{\pi x}{L} \operatorname{sen} \frac{\pi x}{kL} dx. \tag{IX.98}$$

Los límites de integración se tomaron sobre la región en la que $\chi_0(x)$ es diferente de cero, pues $k > 1$. Realizando la integral se obtiene

$$c_n = \frac{2k\sqrt{k}}{\pi(k^2 - n^2)} \operatorname{sen} \frac{n\pi}{k}. \tag{IX.99}$$

Por lo tanto,

$$P_n(k) = \frac{4k^3}{\pi^2 \left(k^2 - n^2\right)^2} \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi}{k}. \tag{IX.100}$$

Esta expresión predice para $k = 1$ (cuando la pared permanece inmóvil),

$$P_n(1) = \frac{4}{\pi^2 \left(1 - n^2\right)^2} \operatorname{sen}^2 n\pi = \delta_{1n}. \tag{IX.101}$$

Como era de esperarse, en este caso la probabilidad $P_n(1)$ es distinta de cero sólo para $n = 1$ (el resultado se obtiene aplicando la regla de L'Hôpital)

La probabilidad de que el sistema esté en el estado base de la nueva caja con un valor arbitrario de k, es

$$P_1(k) = \frac{4k^3}{\pi^2 \left(k^2 - 1\right)^2} \operatorname{sen}^2 \frac{\pi}{k}. \tag{IX.102}$$

El estado más probable es aquél para el cual la función $\operatorname{sen}^2(n\pi/k) / \left(k^2 - n^2\right)^2$ presenta un máximo. Como esta función tiene un máximo pronunciado alrededor del valor $n = k$, el estado más probable corresponde al entero más próximo a k.

Cuando la pared se mueve muy lentamente, la función de onda tiene en todo momento tiempo de acomodarse a la nueva situación, por lo que irá evolucionando, y no se trata estrictamente de estados estacionarios, sino hasta después de que se alcance el estado final.

IX.16 Demuestre que en general se cumple que

$$\frac{d\left\langle (\Delta\hat{x})^2 \right\rangle}{dt} = \frac{1}{m} \left\langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} - 2\overline{xp} \right\rangle .$$

Este resultado muestra que para que σ_x^2 alcance un valor constante al transcurrir el tiempo, se requiere que la correlación simetrizada entre $\hat{x}$ y $\hat{p}$ tienda a desaparecer.

Por definición, se tiene

$$\sigma_x^2 = (\Delta\hat{x})^2 = \hat{x}^2 - \langle\hat{x}\rangle^2 . \tag{IX.103}$$

Como la cantidad $\langle\hat{x}\rangle^2$ es una función del tiempo en el caso general, para estudiar la evolución temporal de $(\Delta\hat{x})^2$ debemos usar la ecuación de movimiento de Heisenberg completa (IX.38), lo que da

$$i\hbar \frac{d\,(\Delta\hat{x})^2}{dt} = \left[\hat{x}^2, \hat{H}\right] - 2i\hbar \langle\hat{x}\rangle \frac{d\,\langle\hat{x}\rangle}{dt}. \tag{IX.104}$$

De

$$\left[\hat{x}, \hat{H}\right] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}$$

sigue

$$\left[\hat{x}^2, \hat{H}\right] = \hat{x}\left[\hat{x}, \hat{H}\right] + \left[\hat{x}, \hat{H}\right]\hat{x} = \frac{i\hbar}{m}\left(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\right), \tag{IX.105}$$

que sustituido en (IX.104), da

$$\frac{d\,(\Delta\hat{x})^2}{dt} = \frac{1}{m}\left(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\right) - \frac{2}{m}\langle\hat{x}\rangle\langle\hat{p}\rangle . \tag{IX.106}$$

Tomando valores esperados se obtiene

$$\frac{d\left\langle (\Delta\hat{x})^2 \right\rangle}{dt} = \frac{1}{m}\left\langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} - 2\overline{xp} \right\rangle , \tag{IX.107}$$

tal como se pedía demostrar.

Es frecuente (pero no universalmente practicado) tomar la cantidad $\Gamma_{xp} = \frac{1}{2}\left\langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \right\rangle - \overline{x\,p}$ como la correlación de las variables x y p. Aceptando esta definición, la ecuación (IX.107) establece que es la correlación Γ_{xp} la que determina la evolución de σ_x^2:

$$\frac{d\sigma_x^2}{dt} = \frac{2}{m}\Gamma_{xp}. \tag{IX.108}$$

Con definiciones apropiadas, esto mismo ocurre en los sistemas clásicos, pues la ecuación (IX.107) sigue directamente de la definición general (IX.103) (tómese en cuenta que las ecuaciones de Heisenberg son formalmente iguales a las correspondientes ecuaciones clásicas).

IX.17 Demuestre la validez de la siguiente versión tensorial del teorema del virial para un sistema de varias partículas:

$$\sum_\alpha \left\langle -\frac{1}{m^\alpha} p_i^\alpha p_j^\alpha \right\rangle + \sum_\alpha \left\langle x_i^\alpha \frac{\partial V}{\partial x_j^\alpha} \right\rangle = 0.$$

El hamiltoniano de un sistema cuántico de varias partículas se construye en forma análoga al caso clásico correspondiente, por lo que puede escribirse en la siguiente forma para el caso tridimensional

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{3}\sum_{\alpha=1}^{N} \frac{(p_i^\alpha)^2}{2m^\alpha} + V\left(\mathbf{r}^\alpha\right), \tag{IX.109}$$

donde el índice α etiqueta a las diferentes partículas o sus coordenadas. Para un sistema acotado (con movimientos restringidos a una región finita del espacio) que ha alcanzado un estado estacionario, debe cumplirse que

$$\frac{d}{dt}\left\langle \sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{i=1}^{3} x_i^\alpha p_i^\alpha \right\rangle = 0. \tag{IX.110}$$

Esta demanda es una generalización natural de la condición

$$\frac{d}{dt}\left\langle \mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{p}} \right\rangle = 0 \tag{IX.111}$$

utilizada para casos similares en el problema ilustrativo 9.1 del texto.

Pero es posible ser más general; para ello basta observar que una vez que se ha alcanzado un estado estacionario, el valor medio de cualquier variable independiente del tiempo deja de depender del tiempo, por lo que, en particular, se debe cumplir la siguiente condición, más informativa que (IX.110) por ser más general:

$$\frac{d}{dt}\left\langle \sum_{\alpha=1}^{N} x_i^\alpha p_j^\alpha \right\rangle = 0. \tag{IX.112}$$

A su vez, esta demanda es una forma particular de la condición general

$$\left\langle [\hat{A}, \hat{H}] \right\rangle = 0, \tag{IX.113}$$

donde $\hat{A}$ es una variable dinámica arbitraria que no depende del tiempo, y el promedio se realiza sobre un estado estacionario (esta generalización se discute en el problema ilustrativo 9.1 del texto, y es resultado directo de la condición $\left\langle d\hat{A}/dt \right\rangle = 0$).

Utilizando la ecuación de movimiento de Heisenberg reescribimos (IX.112) en la forma

$$\sum_{\alpha=1}^{N} \left\langle \left[x_i^\alpha p_j^\alpha, \hat{H} \right] \right\rangle = 0. \tag{IX.114}$$

Calcularemos los dos conmutadores requeridos por separado. Tenemos primero

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{\beta=1}^{N}\sum_{k=1}^{3} \left[x_i^\alpha p_j^\alpha, \frac{1}{2m^\beta} p_k^\beta p_k^\beta \right] &= \sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{\beta=1}^{N}\sum_{k=1}^{3} \frac{1}{2m^\beta} \left[x_i^\alpha, p_k^\beta p_k^\beta \right] p_j^\alpha \\ &= i\hbar \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{1}{m^\alpha} p_i^\alpha p_j^\alpha. \end{aligned} \tag{IX.115}$$

El conmutador restante es

$$\sum_{\alpha=1}^{N} \left[x_i^\alpha p_j^\alpha, V \right] = \sum_{\alpha=1}^{N} x_i^\alpha \left(-i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_j^\alpha} \right). \tag{IX.116}$$

Sumando ambos resultados y usando la ecuación (IX.114), queda

$$\sum_{\alpha=1}^{N} \left(\frac{1}{m^\alpha} \left\langle p_i^\alpha p_j^\alpha . \right\rangle - \left\langle x_i^\alpha \frac{\partial V}{\partial x_j^\alpha} \right\rangle \right) = 0. \tag{IX.117}$$

Ésta es la generalización (tensorial) buscada del teorema cuántico del virial.

IX.18 Demuestre la regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn

$$\sum_k (E_k - E_n) \left| \langle k \left| x \right| n \rangle \right|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}.$$

Sugerencia: Considere el elemento de matriz $\left\langle n \left| x\hat{H}x - x^2\hat{H} \right| n \right\rangle$.

Comentario: La importancia de reglas de suma como la presente radica en que todas las cantidades que aparecen en ella son medibles (midiendo frecuencias e intensidades de emisión, etc.), por lo que permiten comprobar las predicciones teóricas para los elementos de matriz involucrados. Esta famosa regla de suma fue establecida en 1925, antes que la mecánica cuántica moderna.

Insertando un desarrollo de la unidad observamos primero que

$$\begin{aligned} \left\langle n \left| x\hat{H}x - x^2\hat{H} \right| n \right\rangle &= \sum_k \left\{ \left\langle n \left| x\hat{H} \right| k \right\rangle \langle k \mid x \mid n \rangle - \langle n \mid x \mid k \rangle \left\langle k \left| x\hat{H} \right| n \right\rangle \right\} \\ &= \sum_k \left\{ E_k \langle n \left| x \right| k \rangle \langle k \left| x \right| n \rangle - E_n \langle n \left| x \right| k \rangle \langle k \left| x \right| n \rangle \right\} \\ &= \sum_k (E_k - E_n) \left| \langle k \mid x \mid n \rangle \right|^2. \end{aligned} \tag{IX.118}$$

Por otra parte, también podemos escribir

$$\left\langle n\left|x\hat{H}x-x^2\hat{H}\right|n\right\rangle=\left\langle n\left|x\left[\hat{H},x\right]\right|n\right\rangle=-\frac{i\hbar}{m}\left\langle n\left|x\hat{p}\right|n\right\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}. \qquad \text{(IX.119)}$$

Para obtener la última igualdad se ha escrito $x\hat{p}=\frac{1}{2}(x\hat{p}+\hat{p}x)+i\hbar/2$ y considerado que la correlación Γ_{xp} es nula en el estado n. Igualando ambas expresiones obtenemos la regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn:

$$\sum_k\left(E_k-E_n\right)\left|\left\langle k\left|x\right|n\right\rangle\right|^2=\frac{\hbar^2}{2m}. \qquad \text{(IX.120)}$$

IX.19 Demuestre la siguiente regla de suma:

$$\sum_k\left(E_k-E_j\right)\left[\left\langle j\left|f\right|k\right\rangle\left\langle k\left|g\right|j\right\rangle+\left\langle j\left|g\right|k\right\rangle\left\langle k\left|f\right|j\right\rangle\right]=\frac{\hbar^2}{m}\left\langle j\left|\nabla f\cdot\nabla g\right|j\right\rangle,$$

donde f y g son funciones arbitrarias de la posición y el hamiltoniano es de la forma $\hat{H}=\hat{p}^2/2m+V(\mathbf{r})$. Notése que con $f=g=x$ se recupera la regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn. *Sugerencia*: Considere el doble conmutador $\left[\left[\hat{A},\hat{H}\right],\hat{B}\right]$ con $\hat{A}$ y $\hat{B}$ operadores hermitianos y pase al caso en que $\hat{A}$ y $\hat{B}$ dependen sólo de $\mathbf{r}$.

Con $\hat{H}$ un Hamiltoniano de la forma usual, se puede escribir

$$\left[\left[\hat{A},\hat{H}\right],\hat{B}\right]=\hat{A}\hat{H}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\hat{H}-\hat{H}\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{H}\hat{A}. \qquad \text{(IX.121)}$$

Cuando $\hat{A}$ y $\hat{B}$ dependen sólo de $\mathbf{r}$, conmutan con V y podemos escribir

$$\left[\left[\hat{A},\hat{H}\right],\hat{B}\right]=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\hat{A}\nabla^2\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\nabla^2-\nabla^2\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\nabla^2\hat{A}\right]. \qquad \text{(IX.122)}$$

Para $f=\hat{A}(\mathbf{r})$, $g=\hat{B}(\mathbf{r})$, esta igualdad se reduce a

$$\left[\left[f,\hat{H}\right],g\right]=\frac{\hbar^2}{m}\left[\nabla f\cdot\nabla g\right]. \qquad \text{(IX.123)}$$

Consideremos ahora la siguiente expresión, la que transformamos de manera similar a como se hizo en el problema anterior:

$$\begin{aligned}
\left\langle j\left|\left[\left[f,\hat{H}\right],g\right]\right|j\right\rangle &= \left\langle j\left|f\hat{H}g\right|j\right\rangle+\left\langle j\left|g\hat{H}f\right|j\right\rangle-\left\langle j\left|\hat{H}fg\right|j\right\rangle-\left\langle j\left|gf\hat{H}\right|j\right\rangle\\
&= \sum_k\left\{\left\langle j\left|f\hat{H}\right|k\right\rangle\left\langle k\left|g\right|j\right\rangle+\left\langle j\left|g\hat{H}\right|k\right\rangle\left\langle k\left|f\right|j\right\rangle\right.\\
&\quad \left.-\left\langle j\left|\hat{H}f\right|k\right\rangle\left\langle k\left|g\right|j\right\rangle-\left\langle j\left|g\right|k\right\rangle\left\langle k\left|f\hat{H}\right|j\right\rangle\right\}\\
&= \sum_k\left\{E_k\left\langle j\left|f\right|k\right\rangle\left\langle k\left|g\right|j\right\rangle+E_k\left\langle j\left|g\right|k\right\rangle\left\langle k\left|f\right|j\right\rangle\right.\\
&\quad \left.-E_j\left\langle j\left|f\right|k\right\rangle\left\langle k\left|g\right|j\right\rangle-E_j\left\langle j\left|g\right|k\right\rangle\left\langle k\left|f\right|j\right\rangle\right\}\\
&= \sum_k\left[\left(E_k-E_j\right)\left(\left\langle j\left|f\right|k\right\rangle\left\langle k\left|g\right|j\right\rangle\right.\right.\\
&\quad \left.\left.+\left\langle j\left|g\right|k\right\rangle\left\langle k\left|f\right|j\right\rangle\right)\right], \qquad \text{(IX.124)}
\end{aligned}$$

usando (IX.121). Finalmente, con ayuda de (IX.123) obtenemos[4]

$$\sum_k (E_k - E_j) \left[\langle j \mid f \mid k \rangle \langle k \mid g \mid j \rangle + \langle j \mid g \mid k \rangle \langle k \mid f \mid j \rangle \right]$$
$$= \left\langle j \mid \left[\left[f, \hat{H} \right], g \right] \mid j \right\rangle = \frac{\hbar^2}{m} \langle j \mid [\nabla f \cdot \nabla g] \mid j \rangle \,. \qquad \text{(IX.125)}$$

IX.2. Problemas adicionales

IX.20 Considere un operador $\hat{F}$ que conmuta con el hamiltoniano $\hat{H}$ de un sistema dado. Demuestre que:

a) Si ψ_n es un estado propio de $\hat{H}$ con valor propio E_n, entonces $\hat{F}\psi_n$ también es un estado propio de $\hat{H}$ que corresponde al mismo eigenvalor E_n.

b) Si existe algún otro operador $\hat{G}$ que conmuta con $\hat{H}$, pero no con $\hat{F}$, entonces el eigenvalor E_n es necesariamente degenerado.

a) La primera parte del problema se resuelve inmediatamente, pues del hecho de que $\hat{H}$ y $\hat{F}$ conmutan

$$\left[\hat{H}, \hat{F} \right] = 0, \qquad \text{(IX.126)}$$

y del hecho de que ψ_n es estado propio de $\hat{H}$,

$$\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n, \qquad \text{(IX.127)}$$

sigue que

$$\hat{H}\hat{F}\psi_n = \hat{F}\hat{H}\psi_n = E_n \hat{F}\psi_n, \qquad \text{(IX.128)}$$

resultado que muestra que $\chi_n \equiv \hat{F}\psi_n$ es eigenfunción de $\hat{H}$ con el mismo eigenvalor E_n.

b) Consideremos ahora un tercer operador $\hat{G}$ que conmuta con el hamiltoniano,

$$\left[\hat{H}, \hat{G} \right] = 0, \qquad \text{(IX.129)}$$

pero no con el operador $\hat{F}$, de tal forma que $\left[\hat{F}, \hat{G} \right] \neq 0$. Aplicamos el resultado del inciso anterior al operador $\hat{F}$, de tal manera que sabemos que $\chi_n \equiv \hat{F}\psi_n$ es eigenfunción simultánea de $\hat{H}$ y de $\hat{F}$ con eigenvalor E_n. Pero como $\left[\hat{F}, \hat{G} \right] \neq 0$, χ_n no puede ser eigenfunción de $\hat{G}$, esto significa que ψ_n y $\hat{G}\psi_n$ son linealmente independientes. En otras palabras, al menos una de las funciones ψ_n y $\hat{G}\psi_n$ posee componentes ortogonales a la otra, lo que indica que existe al menos una dirección en el espacio de Hilbert ortogonal a ψ_n, y que corresponde al mismo eigenvalor E_n. Luego el eigenvalor en cuestión es degenerado.

El resultado muestra que, en general, si existen dos operadores que conmutan con el hamiltoniano pero no entre sí, los niveles del sistema son degenerados.

Una versión alterna del presente problema puede verse en el problema XIII.28; ahí (y en el capítulo 12 del texto) se discute el caso particular, pero muy importante, de los operadores de momento angular en los problemas con potencial central.

[4]Mayores detalles se pueden ver en E. M. Ferreira y J. Sesma, *Notas de Física* (CBPF) **12**:20 (1967) 341.

IX.21 El teorema de Ehrenfest $\langle p\rangle = m\,(d\,\langle x\rangle\,/dt)$, aplicado a un problema estacionario, da $\langle p\rangle = 0$. Considere el caso de partícula libre con normalización de Born (condiciones periódicas en el intervalo $[0, L]$). Demuestre que en este caso $\langle p\rangle \neq 0$ y resuelva la paradoja.

Las funciones de onda de partícula libre normalizadas dentro de la caja de ancho L son

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i2\pi nx/L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{IX.130}$$

y arrojan para el valor esperado del momento lineal

$$\langle p\rangle_n = \frac{2\pi\hbar}{L} n, \tag{IX.131}$$

cantidad que es diferente de cero para toda n distinta de cero, lo que muestra que el teorema de Ehrenfest no se satisface en este caso.

La explicación es que para estas funciones propias no se cumple que

$$\left[\hat{H}, x\right] = -i\hbar\frac{\hat{p}}{m}, \tag{IX.132}$$

pues integrando por partes se comprueba que

$$m\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \langle\hat{p}\rangle - \frac{L}{2}\left\langle\delta(x)\hat{p} + \hat{p}\delta(x)\right\rangle. \tag{IX.133}$$

Es claro que esta ecuación difiere del correspondiente teorema de Ehrenfest cuando el último término no se anula idénticamente. En el presente caso los términos de la derecha se cancelan mutuamente, lo que da $d\,\langle x\rangle\,/dt = 0$. Obsérvese que desde el principio el problema manifiesta un comportamiento anómalo, pues tratándose de un movimiento unidimensional acotado, no debería existir degeneración, pero sucede que para $n \neq 0$ los niveles son doblemente degenerados.[5]

IX.22 Considere una partícula sobre la que actúa una fuerza constante F.

a) Integre las ecuaciones de Heisenberg de este sistema y compare los resultados con el caso clásico.

b) Demuestre que la dispersión del momento es constante en el tiempo.

El hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - Fx = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - Fx. \tag{IX.134}$$

Las ecuaciones de Heisenberg, escritas en la forma dada en la ecuación (T9.36)

$$\overset{\wedge}{\dot{x}} = \frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}}, \quad \overset{\wedge}{\dot{p}} = -\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{x}},$$

se reducen en este caso a

$$\overset{\wedge}{\dot{x}} = \frac{1}{m}\hat{p}, \tag{IX.135}$$

$$\overset{\wedge}{\dot{p}} = F. \tag{IX.136}$$

[5] Mayores detalles pueden verse en R.N. Hill, *Am. J. Phys.* **41** (1973) 736.

La solución general de la última ecuación es

$$\hat{p} = Ft + \hat{p}_0, \tag{IX.137}$$

donde $\hat{p}_0$ representa el valor inicial del operador de momento. Sustituyendo esta expresión en (IX.135) se obtiene para el operador de velocidad

$$\overset{\wedge}{\dot{x}} = \frac{F}{m}t + \frac{\hat{p}_0}{m}, \tag{IX.138}$$

de donde, después de una integración, sigue que

$$\hat{x} = \frac{F}{2m}t^2 + \frac{\hat{p}_0}{m}t + \hat{x}_0, \tag{IX.139}$$

con $\hat{x}_0$ el operador asociado a la posición inicial.

Los valores esperados de la posición y del momento son

$$\langle \hat{x} \rangle = \frac{F}{2m}t^2 + \frac{\langle \hat{p}_0 \rangle}{m}t + \langle \hat{x}_0 \rangle \,, \tag{IX.140}$$

$$\langle \hat{p} \rangle = Ft + \langle \hat{p}_0 \rangle \,. \tag{IX.141}$$

Estas expresiones coinciden con las ecuaciones para la trayectoria clásica de partículas libres, como era de esperarse de una aplicación del teorema de Ehrenfest, por tratarse de un problema con fuerza constante.

Los resultados anteriores pueden derivarse alternativamente usando la ecuación (T9.32), de cuya aplicación al presente caso sigue

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{x}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x}, \hat{H}\right] = \frac{1}{2i\hbar m}\left[\hat{x}, \hat{p}^2\right] \\ &= \frac{1}{i\hbar m}\hat{p}\left[\hat{x}, \hat{p}\right] = \frac{1}{m}\hat{p}, \end{aligned} \tag{IX.142}$$

y

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p}, \hat{H}\right] = -\frac{F}{i\hbar}\left[\hat{p}, x\right] = F. \tag{IX.143}$$

Utilizando ahora la ecuación (T9.20) se puede escribir

$$\frac{d\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[\hat{p}^2, \hat{H}\right] \right\rangle = \frac{iF}{\hbar}\left\langle \left[\hat{p}^2, x\right] \right\rangle = \frac{2iF}{\hbar}\left\langle \hat{p}\left[\hat{p}, x\right] \right\rangle, \tag{IX.144}$$

es decir,

$$\frac{d\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle}{dt} = 2F\left\langle \hat{p} \right\rangle. \tag{IX.145}$$

Además,

$$\frac{d\left\langle \hat{p} \right\rangle^2}{dt} = 2\left\langle \hat{p} \right\rangle \frac{d\left\langle \hat{p} \right\rangle}{dt} = 2F\left\langle \hat{p} \right\rangle, \tag{IX.146}$$

de donde

$$\frac{d}{dt}\left(\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{p} \right\rangle^2\right) = \frac{d\sigma_p^2}{dt} = 0, \tag{IX.147}$$

lo que muestra que la dispersión del momento es constante,

$$\sigma_p^2 = \text{cte}. \tag{IX.148}$$

Es sencillo obtener el valor explícito de esta constante integrando la ecuación (IX.145), lo que conduce a

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = 2F \int \langle \hat{p} \rangle \, dt = F^2 t^2 + 2F \langle \hat{p}_0 \rangle \, t + \left\langle \hat{p}^2 \right\rangle_0 = \langle \hat{p} \rangle^2 - \langle \hat{p}_0 \rangle^2 + \left\langle \hat{p}^2 \right\rangle_0 , \quad \text{(IX.149)}$$

en donde se usó (IX.141). De aquí sigue que

$$\sigma_p^2 = \left\langle \hat{p}^2 \right\rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \left\langle \hat{p}^2 \right\rangle_0 - \langle \hat{p}_0 \rangle^2 = \sigma_{p0}^2. \quad \text{(IX.150)}$$

La dispersión del momento está totalmente determinada por su valor inicial en este caso, pues se trata de una constante.

IX.23 Derive la ecuación de continuidad para una partícula cargada en presencia de un campo electromagnético y demuestre que es invariante ante transformaciones de norma locales.

El hamiltoniano para una partícula en presencia de un campo electromagnético se construyó en el problema IX.6; insertando este hamiltoniano en la ecuación de Schrödinger se obtiene

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\nabla}^2 \psi + \frac{ie\hbar}{mc} \left[\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \tfrac{1}{2} \left(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{A} \right) \right] \psi + \left(\frac{e^2}{2mc} \mathbf{A}^2 + e\phi \right) \psi. \quad \text{(IX.151)}$$

Considerando al potencial vectorial $\mathbf{A}$ y al potencial escalar ϕ como funciones reales, la ecuación adjunta de Schrödinger resulta

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\nabla}^2 \psi^* - \frac{ie\hbar}{mc} \left[\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \tfrac{1}{2} \left(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{A} \right) \right] \psi^* + \left(\frac{e^2}{2mc} \mathbf{A}^2 + e\phi \right) \psi^*. \quad \text{(IX.152)}$$

La ecuación de continuidad puede obtenerse siguiendo un procedimiento similar al usado en el capítulo 5 del texto para el caso conservativo. Multiplicando (IX.151) y (IX.152) por ψ^* y ψ, respectivamente, y restando, se obtiene

$$\begin{aligned} i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi^* \boldsymbol{\nabla}^2 \psi - \psi \boldsymbol{\nabla}^2 \psi^* \right) \\ &\quad + \frac{ie\hbar}{mc} \left[\mathbf{A} \cdot \nabla \left(\psi^* \psi \right) + \psi^* \psi \left(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{A} \right) \right]. \quad \text{(IX.153)} \end{aligned}$$

Como

$$\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\nabla} \left(\psi^* \psi \right) + \psi^* \psi \left(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{A} \right) = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\mathbf{A} \psi^* \psi \right)$$

y

$$\psi^* \boldsymbol{\nabla}^2 \psi - \psi \boldsymbol{\nabla}^2 \psi^* = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\psi^* \boldsymbol{\nabla} \psi - \psi \boldsymbol{\nabla} \psi^* \right),$$

podemos reescribir (IX.153) en la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\psi^* \psi \right) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \boldsymbol{\nabla} \psi^* - \psi^* \boldsymbol{\nabla} \psi \right) - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \psi^* \psi \right] = 0. \quad \text{(IX.154)}$$

Esta expresión se reduce a la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j} = 0, \quad \text{(IX.155)}$$

identificando a

$$\rho = \psi^* \psi \tag{IX.156}$$

como la densidad de partículas (o de probabilidad) y a

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \boldsymbol{\nabla} \psi^* - \psi^* \boldsymbol{\nabla} \psi \right) - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \psi^* \psi \tag{IX.157}$$

como la densidad de flujo de partículas (o de corriente de probabilidad). Observe que la expresión para la densidad de partículas es la misma que en ausencia del campo electromagnético, pero la densidad de flujo adquiere un término extra.

Estudiaremos ahora el comportamiento de esta ecuación ante transformaciones de norma locales. Como se vio en el problema IX.7, una transformación de norma local se realiza con el cambio

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \to \mathbf{A}'(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + \boldsymbol{\nabla} \chi(\mathbf{x}), \tag{IX.158}$$

$$\psi \to \psi' = e^{i\Lambda} \psi; \qquad \Lambda = \frac{e}{\hbar c} \chi. \tag{IX.159}$$

De aquí sigue que

$$\begin{aligned} \psi'^* \boldsymbol{\nabla} \psi' - \psi' \boldsymbol{\nabla} \psi'^* &= \psi^* \left(\boldsymbol{\nabla} \psi + i \psi \boldsymbol{\nabla} \Lambda \right) - \psi \left(\boldsymbol{\nabla} \psi^* - i \psi^* \boldsymbol{\nabla} \Lambda \right) \\ &= \psi^* \boldsymbol{\nabla} \psi - \psi \boldsymbol{\nabla} \psi^* + 2 i \psi^* \psi \boldsymbol{\nabla} \Lambda, \end{aligned} \tag{IX.160}$$

$$\mathbf{A}' \psi'^* \psi' = \left(\mathbf{A} + \boldsymbol{\nabla} \chi \right) \psi^* \psi = \mathbf{A} \psi^* \psi + \frac{\hbar c}{e} \psi^* \psi \boldsymbol{\nabla} \Lambda. \tag{IX.161}$$

Combinando estas expresiones, se obtiene que la densidad de flujo es invariante de norma:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}' &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi' \boldsymbol{\nabla} \psi'^* - \psi'^* \boldsymbol{\nabla} \psi' \right) - \frac{e}{mc} \mathbf{A}' \psi'^* \psi' \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \boldsymbol{\nabla} \psi^* - \psi^* \boldsymbol{\nabla} \psi - 2 i \psi^* \psi \boldsymbol{\nabla} \Lambda \right) - \frac{e}{mc} \left(\mathbf{A} \psi^* \psi + \frac{\hbar c}{e} \psi^* \psi \boldsymbol{\nabla} \Lambda \right) = \mathbf{J}. \end{aligned} \tag{IX.162}$$

Como es inmediato que también la densidad de probabilidad es invariante de norma,

$$\rho' = \psi'^* \psi' = \psi^* \psi = \rho, \tag{IX.163}$$

queda demostrado que la ecuación de continuidad para una partícula sometida a la acción de un campo electromagnético es invariante ante transformaciones locales de norma.

* **IX.24** Considere el caso de electrones moviéndose en una región del espacio libre de campos magnéticos, es decir, con $\mathbf{B} = 0$. Utilice la descripción usada en los problemas IX.6 y IX.7 con un potencial vectorial apropiado y compare con la descripción que da la teoría usual para un potencial escalar.

Como $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, la condición $\mathbf{B} = 0$ puede escribirse como $\mathbf{A} \equiv \nabla \zeta$, o bien, directamente, como $\mathbf{A} = 0$. En el primer caso la ecuación (estacionaria) a resolver es

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi' + V(\mathbf{r}) \psi' = E \psi', \tag{IX.164}$$

mientras que en el segundo caso queda

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla\right)^2\psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi. \tag{IX.165}$$

El análisis realizado en el problema IX.7 sugiere que en términos de la función ζ, dada por la integral del vector potencial,

$$\zeta = \int^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}', t)\cdot d\mathbf{r}', \tag{IX.166}$$

donde la trayectoria de integración parte de algún punto fijo convenientemente elegido, se escriba

$$\psi' = e^{-i(e/\hbar c)\zeta}\psi. \tag{IX.167}$$

Es claro que este procedimento puede realizarse sólo para el caso $\mathbf{B} = 0$, pues solamente entonces el potencial vectorial puede escribirse como un gradiente. Si consideramos dos trayectorias diferentes de integración C_1 y C_2, la diferencia entre las dos integrales de línea está dada por la integral sobre la trayectoria cerrada $C = C_1 + C_2$, lo que da

$$\begin{aligned}\Delta\zeta &\equiv \int_{C_1}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{r} - \int_{C_2}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{r} = \oint_C \mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{r}\\ &= \int_S \nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{S} = \int_S \mathbf{B}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{S} = \Phi,\end{aligned} \tag{IX.168}$$

donde Φ representa al flujo magnético contenido dentro la trayectoria cerrada C. Como en el presente caso $\mathbf{B} = 0$, resulta igualmente $\Phi = 0$, y la fase ζ dada por la ecuación (IX.166) resulta independiente de la trayectoria de integración. Esta independencia garantiza que la función de onda pueda escogerse como una función univaluada. En particular, podemos tomar $\zeta = 0$, lo que reduce la ecuación (IX.164) a la (IX.165).

En el caso en que las dos trayectorias de integración encierren un flujo magnético Φ no nulo, se obtienen diferentes fases para electrones desplazándose a lo largo de las diferentes trayectorias. Dos casos de interés son los siguientes.

a) Los electrones se mueven en una región del espacio libre de campos magnéticos, pero que es simplemente conectada, debido a que, por ejemplo, rodea un "agujero" que contiene al flujo magnético. Al completar un circuito, la función de onda de los electrones adquiere el factor de fase $e^{i(e/\hbar c)\Phi}$, y el requisito de que dicha función sea univaluada conduce a que el flujo magnético contenido debe estar cuantizado, pues debe cumplirse que $(e/\hbar c)\Phi = 2\pi n$, o sea,

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{e}n, \quad n = 0, \pm1, \pm2, \ldots \tag{IX.169}$$

Situaciones de este tipo se han observado, por ejemplo, asociadas al movimiento de electrones en un anillo superconductor que rodea una región que contiene un flujo magnético (recuérdese que dentro de un superconductor, $\mathbf{B} = 0$).

b) Al hacer pasar electrones por ambos lados de un delgado solenoide que contiene flujo magnético, pero que no genera campo magnético, de tal manera que $\mathbf{B} = 0$, como se ilustra en la figura IX.1, los haces izquierdo y derecho adquieren fases diferentes, y la función de onda se puede escribir en la forma

$$\psi = \left(\psi_1 e^{i(e/\hbar c)\oint_C \mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{r}} + \psi_2\right) e^{i(e/\hbar c)\int_2 \mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{r}}. \tag{IX.170}$$

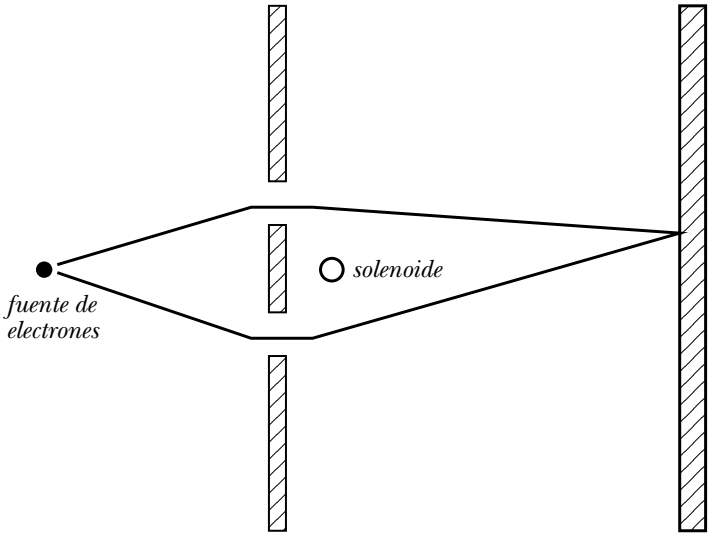


FIGURA IX.1 *Diagrama esquemático del efecto Aharonov-Bohm.*

Este resultado muestra que un cambio en el valor del flujo encerrado por C modifica la fase relativa de las componentes de la función de onda. Esto, a su vez, desplaza la posición del patrón de interferencia generado por esta función de onda, fenómeno que constituye el *efecto Aharonov-Bohm* y que, por cierto, ha sido observado en el laboratorio en repetidas ocasiones. El punto de este resultado que atrae más la atención es que el patrón de interferencia se ve modificado (desplazado), pese a ser generado por electrones que pasan por una región del espacio *libre de campos*.

La interpretación física del efecto Aharonov-Bohm ha suscitado mucha discusión y una amplísima literatura en el curso de los años,[6] pues es usual considerar que, igual que como sucede en la física clásica, en la teoría cuántica el vector potencial carece de realidad física (sólo tienen significado físico sus derivadas, es decir, los campos), por lo que por sí mismo no puede generar efectos observables. Más en concreto, la cantidad $\mathbf{A}$ no tiene sentido físico directo, puesto que puede ser modificada de manera arbitraria con una transformación local de norma; sin embargo, el argumento es irrelevante, pues, como se muestra en la ecuación (IX.168), la contribución a la fase está dada por la integral $\Phi = \oint_C \mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{r} = \int_S \mathbf{B}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{S}$, que es invariante de norma, como lo es el campo $\mathbf{B}$. No es el vector potencial $\mathbf{A}$ la causa del efecto, sino el flujo magnético (localizado) Φ.

El presente es un ejemplo específico de un fenómeno más general, asociado a la aparición de efectos físicos debidos a fases geométricas o topológicas, frecuentemente inesperadas, y que reciben el nombre genérico de *fases de Berry* en la teoría cuántica. Otro ejemplo de fase de Berry se da en un *squid* en rotación, que en el fondo es una variante del efecto Aharonov-Bohm. Squid es el acrónimo de "dispositivo superconductor de interferencia cuántica" (*superconducting quantum interference device*), y consiste básicamente en un pequeño anillo superconductor alimentado con un potencial por ambos extremos de uno de sus diámetros; cada uno de los dos brazos superconductores se interrumpe con una región muy es-

[6] Una discusión muy detallada puede verse en M. Peshkin y A. Tonomura, *The Aharonov-Bohm Effect* (Springer, Nueva York, 1989).

trecha semiconductora, formando lo que se llama una *unión Josephson.* Las dos corrientes que circulan, cada una a través de su correspondiente junta por efecto túnel, se unen en uno de los puntos de alimentación, donde interfieren.

Un análisis similar al anterior muestra que si el dispositivo se coloca en el seno de un campo magnético, aparece una contribución a la fase relativa con que las corrientes interfieren, proporcional a $\Phi = \oint_C \mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{r}$, de manera que la medición del máximo de la corriente total permite determinar el flujo Φ. En la práctica, en vez del campo magnético se pone al squid en rotación alrededor de un eje perpendicular al plano del anillo, lo que genera una fase inercial dada por $\oint_C \mathbf{A}_{\text{equiv}}(\mathbf{r},t)\cdot d\mathbf{r} = 2m_0\int_S \omega\cdot d\mathbf{S} = 2m_0\omega A$, donde A representa el área de las zonas semiconductoras. Este procedimiento ha sido utilizado para determinar el valor de $\hbar/m_0$.

Es interesante señalar que también existen fases geométricas dentro de la física clásica, donde se les conoce como *fases de Hannay*; a continuación se ilustra esto con el ejemplo del péndulo de Foucault. El lagrangiano de un péndulo de Foucault, considerando la fuerza de Coriolis a la latitud θ del punto de observación debida a la rotación diurna de la Tierra, pero despreciando la fuerza centrífuga (que es muy pequeña por ser cuadrática en la velocidad angular Ω de la rotación terrestre), es

$$L = \tfrac{1}{2}m\left(\dot{x}^2+\dot{y}^2\right) - \tfrac{1}{2}m\omega^2\left(x^2+y^2\right) + m\Omega\cos\theta\,(x\dot{y}-y\dot{x})\,. \tag{IX.171}$$

El eje Ox se ha orientado hacia el norte y el Oy hacia el este; la frecuencia de oscilación del péndulo es, naturalmente, $\omega = \sqrt{g/l}$. En términos de la variable compleja $z = x + iy$, la ecuación de movimiento resulta

$$\acute{z} - 2i\Omega\cos\theta\dot{z} + \omega^2 z = 0, \tag{IX.172}$$

y tiene la solución aproximada

$$z = x_0 e^{i2\pi - i(\Omega\cos\theta+\omega)t}, \tag{IX.173}$$

donde hemos tomado la fase para $t = 0$ como 2π. Consideremos ahora que transcurren 24 horas a partir del momento inicial; como en este plazo la Tierra regresa a su posición inicial de rotación, deberíamos recuperar aparentemente la solución inicial. La fase que se obtiene con $t \to T = 2\pi/\Omega$ es, sin embargo,

$$\phi_T = -\frac{2\pi\omega}{\Omega} + 2\pi\,(1-\cos\theta)\,. \tag{IX.174}$$

El primer término es la fase dinámica $-\omega T$ que se obtendría para un péndulo usual de frecuencia ω, referido a un sistema coordenado que no gira y resulta natural. El segundo término es un ejemplo de fase geométrica y representa el ángulo sólido barrido por el plano del péndulo en el curso de las 24 horas consideradas.

IX.3. Ejercicios

IX.25 Demuestre que los operadores $\hat{P}_\pm$ definidos en el problema IX.1 satisfacen todos los requerimientos apropiados para ser considerados como (un conjunto completo de) proyectores.

IX.26 Complete los cálculos de los conmutadores, para llegar al resultado final a partir de la ecuación (IX.42) en el problema IX.6.

IX.27 Demuestre que la traza de un operador $\hat{A}$, $\mathrm{tr}\,\hat{A} = \sum_n \left\langle u_n \left| \hat{A} \right| u_n \right\rangle$, es independiente de la base ortonormal $\{|u_n\rangle\}$ que se elija para su evaluación.

IX.28 Demuestre que si el conjunto $\{|\varphi_n\rangle\}$ forma una base completa ortonormal, $\langle \varphi_n \mid \varphi_m \rangle = \delta_{nm}$, entonces el conjunto formado por los vectores

$$|\tilde{\varphi}_n\rangle = \hat{U}\,|\varphi_n\rangle$$

con $\hat{U}$ un operador unitario, es también ortonormal. Esto muestra que un operador unitario actuando sobre una base ortonormal genera otra base ortonormal.

IX.29 Usando el teorema del virial demuestre que:

a) Si el potencial $V(\mathbf{r})$ decrece radialmente en todo punto fuera del origen, no existen estados propios del hamiltoniano.

b) Si en todo punto fuera del origen se cumple que $\mathbf{r} \cdot \nabla V(\mathbf{r}) \leq -\gamma V(\mathbf{r})$ con $0 < \gamma < 2$, no existen valores propios del hamiltoniano $E \geq 0$.

c) Para el caso coulombiano en que se cumplan las condiciones de aplicabilidad del teorema del virial, no existen estados ligados con $E \geq 0$.

IX.30 Demuestre que dos operadores hermitianos conmutan si poseen las mismas funciones propias.

IX.31 Demuestre que el conmutador de dos variables que se conservan es una cantidad conservada. *Observación*: un resultado análogo se obtiene en la dinámica clásica para los paréntesis de Poisson.

IX.32 Demuestre que la dispersión del momento de un electrón sujeto a un movimiento unidimensional bajo el potencial $V = -Cx$, con $C > 0$, es constante.

IX.33 El hamiltoniano que describe un oscilador unidimensional en un campo eléctrico externo uniforme y constante es

$$H = \frac{p^2(t)}{2m} + \tfrac{1}{2} m\omega^2 x^2(t) - e\mathcal{E}x(t).$$

Derive las ecuaciones de Heisenberg de este sistema y resuélvalas en términos de las condiciones iniciales $\hat{x}(0)$ y $\hat{p}(0)$. Demuestre que para $t_2 \neq t_1$, $[x(t_1), x(t_2)] \neq 0$.

IX.34 Un estado de partículas libres está descrito por la función de onda

$$\psi_{p_0}(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ip_0 x/\hbar}.$$

Determine la función de onda que describe este estado en la representación p.

IX.35 Una transformación de Galileo del sistema de coordenadas S conduce a un nuevo sistema S', en movimiento relativo con velocidad constante $\mathbf{v}$ respecto al primero. La descripción clásica de esta transformación es

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}t,$$

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} - m\mathbf{v}.$$

La forma de las ecuaciones clásicas de movimiento permanece invariante frente a esta transformación, lo que muestra que los dos sistemas son dinámicamente equivalentes, y que la noción de reposo absoluto es ajena a la mecánica clásica.

Es de esperarse que un principio similar opere en mecánica cuántica. Demuestre que la ecuación general de Schrödinger es invariante (salvo por la posible adición a la energía de una constante irrelevante) frente a la transformación

$$\psi'(\mathbf{r}', t) = e^{-im\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}'/\hbar}\psi(\mathbf{r}' + \mathbf{v}t, t).$$

Alternativamente, la transformación de Galileo en mecánica cuántica se escribe en la forma

$$\psi'(\mathbf{r}', t) = e^{-i\mathbf{v}\cdot(m\mathbf{r}' - \hat{\mathbf{p}}t)/\hbar}\psi(\mathbf{r}', t).$$

Demuestre, usando la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff discutida en el problema ilustrativo 10.1 del texto, que ambas expresiones son equivalentes. Demuestre asimismo que para una función arbitraria $f(\mathbf{z})$ se cumple que

$$\langle\psi| f(\mathbf{r}) |\psi\rangle = \left\langle\psi'\right| f(\mathbf{r}' + \mathbf{v}t) \left|\psi'\right\rangle,$$

$$\langle\psi| f(\mathbf{p}) |\psi\rangle = \left\langle\psi'\right| f(\mathbf{p}' + m\mathbf{v}) \left|\psi'\right\rangle.$$

IX.36 Un átomo de hidrógeno en su estado base se mueve con velocidad $\mathbf{v}$ respecto al laboratorio. Repentinamente, una colisión detiene al protón nuclear. ¿Cuál es la probabilidad de que el átomo permanezca en su estado base?

Sugerencia: para simplificar, considere despreciable la masa del electrón, donde sea prudente.

IX.37 Considere el operador $\hat{A}$ definido por

$$\hat{A}\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \Theta(x - x')\, \psi(x')\, dx',$$

con $\Theta(x - x')$ la función escalón

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ 1, & x > 0. \end{cases}$$

Si ψ y $d\psi/dx$ son integrables para $|x| \to \infty$, demuestre que

$$\hat{A} = \left(\frac{d}{dx}\right)^{-1}.$$

IX.38 Calcule explícitamente $\left[\hat{H}(t), \hat{H}(t')\right]$ y $\Delta H(t)\, \Delta H(t')$ para los dos casos mencionados en el problema IX.14.

IX.39 Calcule la vida media de los dos primeros estados excitados de un electrón ligado a un pozo de potencial cuadrado infinito de anchura a, en ausencia de campos externos.

X. Tópicos complementarios de la teoría de representaciones

X.1. Problemas del texto

X.1 Reescriba las leyes de transformación de operadores y vectores de estado de una representación a otra para los casos en que:

a) ambas variables poseen sólo espectro discreto;

b) ambas variables poseen sólo espectro continuo;

c) ambas variables poseen espectro discreto y continuo.

Los cambios de representación se realizan con los métodos expuestos en la sección 10.3 del texto. Para variables discretas la transición de la representación R a la Q puede escribirse en la forma

$$|Q_s\rangle = \sum_n |R_n\rangle \langle R_n|\, Q_s\rangle = \sum_n \varphi_{sn} |R_n\rangle\,, \quad \varphi_{sn} = \langle R_n|\, Q_s\rangle\,; \tag{X.1}$$

$$\begin{aligned} \hat{F}_{s's''} &= \langle Q_{s'}|\, \hat{F}\, |Q_{s''}\rangle = \sum_{n',n''} \langle Q_{s'}|\, R_{n'}\rangle \langle R_{n'}|\, \hat{F}\, |R_{n''}\rangle \langle R_{n''}|\, Q_{s''}\rangle \\ &= \sum_{n',n''} \varphi^*_{s'n'} F_{n'n''} \varphi_{s''n''}, \end{aligned} \tag{X.2}$$

$$\hat{F} = \sum_{n',n''} F_{n'n''} |R_{n'}\rangle \langle R_{n''}| \to \hat{F} = \sum_{s',s''} F_{s's''} |Q_{s'}\rangle \langle Q_{s''}|\,. \tag{X.3}$$

Para pasar de la representación Q a la R se procede a la inversa; específicamente,

$$|R_n\rangle = \sum_s |Q_s\rangle \langle Q_s|\, R_n\rangle = \sum_n \varphi^*_{sn} |Q_s\rangle\,, \tag{X.4}$$

$$\begin{aligned} \hat{F}_{n'n''} &= \langle R_{n'}|\, \hat{F}\, |R_{n''}\rangle = \sum_{s',s''} \langle R_{n'}|\, Q_{s'}\rangle \langle Q_{s'}|\, \hat{F}\, |Q_{s''}\rangle \langle Q_{s''}|\, R_{n''}\rangle \\ &= \sum_{s',s''} \varphi_{s'n'} \hat{F}_{s's''} \varphi^*_{s''n''}. \end{aligned} \tag{X.5}$$

La expresión para los operadores es la misma que (X.3), sólo que con la flecha dirigida en el sentido opuesto.

Para el caso de variables continuas se sustituyen, en las expresiones anteriores, las sumas por las correspondientes integrales. Si las variables poseen espectro discreto y continuo, debe realizarse tanto la suma sobre la parte discreta como la integración sobre el continuo; por ejemplo, la ecuación (X.1) toma la forma

$$|Q_s\rangle = \sum_n |R_n\rangle \langle R_n|\, Q_s\rangle + \int |R\rangle \langle R|\, Q_s\rangle \, dR, \tag{X.6}$$

y así sucesivamente.

X.2 Demuestre que una función de estado con paridad definida en el espacio de configuración tiene la misma paridad en el espacio momental.

Podemos pasar del estado $|\psi\rangle$ descrito en el espacio de configuración a su expresión en el espacio de momentos mediante una transformación de Fourier, usando las ecuaciones (T10.2), lo que da

$$\widetilde{\psi}\,(\mathbf{p},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi\,(\mathbf{r},t)\, e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3r. \tag{X.7}$$

Por hipótesis $\psi\,(\mathbf{r},t)$ posee paridad bien definida, lo que significa que al hacer la reflexión especular que invierte $\mathbf{r}$, $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$, se cumple $\psi\,(-\mathbf{r},t) = \psi\,(\mathbf{r},t)$ si ψ es par, o bien $\psi\,(-\mathbf{r},t) = -\psi\,(\mathbf{r},t)$ si ψ es impar. Haciendo la transformación en (X.7) (lo que equivale al cambio de nombre de la variable de integración) se obtiene

$$\begin{aligned} \widetilde{\psi}\,(\mathbf{p},t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi\,(-\mathbf{r},t)\, e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3r \\ &= \pm\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi\,(\mathbf{r},t)\, e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3r = \pm\widetilde{\psi}\,(-\mathbf{p},t)\,. \end{aligned} \tag{X.8}$$

Este resultado muestra que la paridad de la función de onda en el espacio momental coincide con la que posee en el espacio de configuración. En otras palabras, basta hablar de la paridad del estado.

X.3 Demuestre que $\delta'\,(x-x')$ no es diagonal. *Sugerencia*: utilice propiedades de las variables canónicas conjugadas.

La función propia de $\hat{p}$ en la representación x es $\varphi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\, e^{ipx/\hbar}$; la propiedad de cerradura de estas eigenfunciones se expresa en la forma dada en la ecuación (T10.3),

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p(x)\varphi_p^*(x')dp = \delta\left(x-x'\right). \tag{X.9}$$

Derivando respecto de x y multiplicando por $-i\hbar$ se obtiene

$$\begin{aligned} -i\hbar\delta'\left(x-x'\right) &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial\varphi_p(x)}{\partial x}\varphi_p^*(x')dp \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p^*(x')\hat{p}\varphi_p(x)dp = \left\langle x'\right|\hat{p}\left|x\right\rangle. \end{aligned} \tag{X.10}$$

Vemos que $\delta'\,(x-x')$ es proporcional al elemento de matriz x', x del momento; pero como las variables x y p son canónicamente conjugadas, la matriz $\hat{p}$ no puede ser diagonal en la representación x en la que $\hat{x}$ lo es. Luego $\delta'\,(x-x')$ no es diagonal.

X.4 Use la ecuación de Schrödinger en la representación momental para determinar la energía de amarre y la función de onda de una partícula ligada por el potencial $-\delta(x)/a$ $(a>0)$. Compare los resultados con los del problema VI.3.

Para $E<0$ la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en el espacio de configuración es

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}+b\delta(x)\varphi(x)=k^2\varphi(x), \tag{X.11}$$

con

$$k^2=\frac{2m|E|}{\hbar^2},\quad b=\frac{2m}{\hbar^2 a}. \tag{X.12}$$

Para pasar a la representación momental multiplicamos por $e^{-ipx/\hbar}$ e integramos sobre todo el espacio de configuración, lo que da

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ipx/\hbar}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}\,dx+b\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ipx/\hbar}\delta(x)\varphi(x)\,dx=k^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ipx/\hbar}\varphi(x)\,dx. \tag{X.13}$$

Integrando dos veces por partes el primer término de esta ecuación, obtenemos

$$-\frac{p^2}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\,e^{-ipx/\hbar}\,dx+b\varphi(0)=k^2\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\,e^{-ipx/\hbar}dx, \tag{X.14}$$

donde $\varphi(0)$ es la función de onda evaluada en el punto $x=0$, es decir, una constante. Como

$$\widetilde{\varphi}(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\,e^{-ipx/\hbar}dx \tag{X.15}$$

es la función de onda en el espacio de momentos, la ecuación de Schrödinger en este espacio resulta

$$-\frac{p^2}{\hbar^2}\widetilde{\varphi}(p)+\frac{b}{\sqrt{2\pi\hbar}}\varphi(0)=k^2\widetilde{\varphi}(p). \tag{X.16}$$

La solución de esta ecuación *algebraica* da la función de onda en el espacio de momentos, la que resulta

$$\widetilde{\varphi}(p)=\frac{b\hbar^2}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\varphi(0)}{p^2+\hbar^2k^2}. \tag{X.17}$$

Este interesante resultado muestra que el momento lineal de las partículas ligadas por el potencial delta tiene una distribución proporcional a $\left(p^2+\hbar^2k^2\right)^{-2}$, la que puede alcanzar valores significativos aún para momentos relativamente altos comparados con $\hbar k=\sqrt{2m|E|}$, aunque la máxima amplitud (y probabilidad) corresponde a $p=0$.

La función de onda en el espacio de configuración es

$$\varphi(x)=\frac{b\hbar\varphi(0)}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ipx/\hbar}}{p^2+\hbar^2k^2}\,dp. \tag{X.18}$$

Evaluando la integral se obtiene[1]

$$\varphi(x)=\frac{b\varphi(0)}{2k}\begin{cases}e^{-kx}, & x>0,\\ e^{+kx}, & x<0.\end{cases} \tag{X.19}$$

[1] Gradshteyn y Ridzhik (1980), 3.3545.

Para que esta expresión sea consistente en $x = 0$ debe cumplirse que

$$\frac{b}{2k} = 1, \tag{X.20}$$

es decir,

$$k = \frac{b}{2} = \frac{m}{a\hbar^2}. \tag{X.21}$$

Insertando aquí el valor de $k = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ y despejando, se obtiene para la energía

$$|E| = \frac{m}{2a^2\hbar^2}. \tag{X.22}$$

Concluimos que el potencial delta puede producir un único estado ligado. Como es de esperarse, el presente resultado coincide con el obtenido en el problema VI.3.

X.5 Un sistema está compuesto por dos partículas de espín $1/2$. Obtenga los operadores de proyección de los estados singulete y triplete de espín apropiados a este sistema. *Observación*: La solución de este problema requiere de un previo conocimiento de la teoría de momento angular.

El singulete es el estado de espín total cero, para el cual se tiene $\left\langle \hat{S}^2 \right\rangle_0 = S(S+1) = 0$, mientras que el espín total del triplete es 1, y, por lo tanto, $\left\langle \hat{S}^2 \right\rangle_1 = S(S+1) = 2$ (en unidades $\hbar = 1$). Esto sugiere escribir los operadores de proyección solicitados en la forma

$$\hat{P}_0 = A_0 + B_0\hat{S}^2, \quad \hat{P}_1 = A_1 + B_1\hat{S}^2. \tag{X.23}$$

Denotando los estados con $|SS_3\rangle$, o sea los del triplete con $|1S_3\rangle$ ($S_3 = -1, 0, 1$) y el del singulete con $|00\rangle$, queremos que se cumplan las siguientes ecuaciones:

$$\left(A_0 + B_0\hat{S}^2\right)|00\rangle = |00\rangle\,, \quad \left(A_0 + B_0\hat{S}^2\right)|1S_3\rangle = 0, \tag{X.24}$$

$$\left(A_1 + B_1\hat{S}^2\right)|1S_3\rangle = |1S_3\rangle\,, \quad \left(A_1 + B_1\hat{S}^2\right)|00\rangle = 0. \tag{X.25}$$

Simplificando, se obtiene

$$A_0\,|00\rangle = |00\rangle\,, \quad (A_0 + 2B_0)\,|1S_3\rangle = 0, \tag{X.26}$$

$$(A_1 + 2B_1)\,|1S_3\rangle = |1S_3\rangle\,, \quad A_1\,|00\rangle = 0. \tag{X.27}$$

La primera y la última de estas ecuaciones dan de inmediato $A_0 = 1$, $A_1 = 0$. Multiplicando la segunda por la izquierda por $\langle 00|$, sigue que $A_0 + 2B_0 = 0$, es decir, $B_0 = -1/2$. De la tercera sigue ahora que $B_1 = 1/2$. Queda entonces

$$\hat{P}_0 = 1 - \tfrac{1}{2}\hat{S}^2, \quad \hat{P}_1 = \tfrac{1}{2}\hat{S}^2. \tag{X.28}$$

La relación $\hat{P}_0 + \hat{P}_1 = \mathbb{I}$ muestra que no hay más proyectores linealmente independientes para este sistema, como es de esperarse.

X.6 Si los operadores $\hat{P}_{ij} = \hat{\mathbf{e}}_i\hat{\mathbf{e}}_j$ representan diadas, demuestre que $\hat{P}_i \equiv \hat{P}_{ii}$ es un operador de proyección.

Queremos mostrar que el operador

$$\hat{P}_i = \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_i \tag{X.29}$$

considerado como una diada se comporta como un proyector. Las diadas son tensores de segundo rango escritos de tal forma que preservan su naturaleza vectorial, aunque la notación tiende a obscurecer sus propiedades de transformación tensoriales. Como la diada $\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}$ opera sobre un vector $\hat{\mathbf{C}}$ en la forma[2]

$$\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{C}} = \hat{\mathbf{A}}\left(\hat{\mathbf{B}} \cdot \hat{\mathbf{C}}\right), \tag{X.30}$$

la acción de $\hat{P}_i$ sobre un vector arbitrario $\mathbf{C}$ da

$$\hat{P}_i \mathbf{C} = \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_i \mathbf{C} = \hat{\mathbf{e}}_i \left(\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{C}\right) = \hat{\mathbf{e}}_i C_i. \tag{X.31}$$

Es decir, $\hat{P}_i$ proyecta el vector sobre el que actúa en la dirección del vector $\hat{\mathbf{e}}_i$.

Por otro lado, de su definición es obvio que

$$\hat{P}_i^\dagger = \hat{P}_i \tag{X.32}$$

y que

$$\hat{P}_i \hat{P}_i \mathbf{A} = \hat{P}_i \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_i \mathbf{A} = \hat{P}_i \hat{\mathbf{e}}_i A_i = A_i \hat{\mathbf{e}}_i \left(\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_i\right) = \hat{\mathbf{e}}_i A_i = \hat{P}_i \mathbf{A}, \tag{X.33}$$

que muestra la idempotencia del operador $\hat{P}_i$:

$$\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i. \tag{X.34}$$

Por último, en su propia representación, los elementos de matriz de $\hat{P}_i$ son

$$\left(\hat{P}_i\right)_{nm} = \hat{\mathbf{e}}_n \cdot \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_m = \delta_{in}\delta_{im}, \tag{X.35}$$

por lo que la traza de $\hat{P}_i$ resulta

$$\mathrm{tr}\hat{P}_i = \sum_k \left(\hat{P}_i\right)_{kk} = \sum_k \delta_{ik}\delta_{ik} = 1. \tag{X.36}$$

Los resultados anteriores muestran que $\hat{P}_i = \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_i$ es un operador de proyección.

X.7 Demuestre que los operadores $\hat{S}_k = \sum_{i=1}^k a_i \mid i\rangle\langle i \mid$ con a_i reales son proyectores, pero con traza arbitraria. ¿Sobre qué subespacio proyectan?

Sea $|Q\rangle$ un ket arbitrario. Aplicándole el operador $\hat{S}_k$ obtenemos

$$\hat{S}_k |Q\rangle = \sum_{i=1}^k a_i \mid i\rangle \langle i \mid Q\rangle \equiv \sum_{i=1}^k c_Q(i)\, a_i |i\rangle, \tag{X.37}$$

lo que muestra que $\hat{S}_k$ proyecta un ket arbitrario en el subespacio de dimensión k.

Por otra parte,

$$\hat{S}_k^\dagger = \sum_{i=1}^k a_i^* \mid i\rangle\langle i \mid = \sum_{i=1}^k a_i \mid i\rangle\langle i \mid = \hat{S}_k, \tag{X.38}$$

[2]Una introducción a la teoría de las diadas puede verse en Goldstein (1980) o en Arfken (1985).

pues los coeficientes a_i son reales. Además,

$$\hat{S}_k^2 = \sum_{i=1}^{k} a_i \mid i\rangle\langle i \mid \sum_{j=1}^{k} a_j \mid j\rangle\langle j \mid = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{k} a_i a_j \delta_{ij} \mid i\rangle\langle j \mid = \sum_{i=1}^{k} a_i^2 \mid i\rangle\langle i \mid, \quad \text{(X.39)}$$

mostrando que en general $\hat{S}_k^2 \neq \hat{S}_k$. En su propia representación los elementos de matriz de $\hat{S}_k$ son

$$\left(\hat{S}_k\right)_{mn} = \sum_{i=1}^{k} a_i \langle m \mid i\rangle \langle i \mid n\rangle = \sum_{i=1}^{k} a_i \delta_{im}\delta_{in} \quad \text{(X.40)}$$

y la traza resulta

$$\mathrm{tr}\hat{S}_k = \sum_{l}\sum_{i=1}^{k} a_i \delta_{il}\delta_{il} = \sum_{i=1}^{k} a_i, \quad \text{(X.41)}$$

cuyo valor depende de los coeficientes a_i.

X.8 Un sistema se encuentra en un estado descrito al tiempo t por la función de onda $\Psi(x,t) = \sum_k a_k(t)\,\varphi_k(x)$. Demuestre que si $\hat{P}_s = |\varphi_s\rangle\langle\varphi_s|$, $\left\langle \hat{P}_s \right\rangle$ es igual a la probabilidad del estado s al tiempo t.

Podemos igualmente abstraer de la representación y escribir

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k a_k(t)\,|k\rangle\,, \quad \text{(X.42)}$$

$$\hat{P}_s = |s\rangle\langle s|\,. \quad \text{(X.43)}$$

Resulta así:

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{P}_s \right\rangle &= \left\langle \psi(x,t) \mid \hat{P}_s \mid \psi(x,t) \right\rangle = \sum_{k,k'} \left\langle k' \right| a_{k'}^* \left| s \right\rangle \langle s|\, a_k \left| k \right\rangle \\ &= \sum_{k,k'} a_{k'}^* a_k \delta_{sk'}\delta_{sk} = |a_s|^2\,. \end{aligned} \quad \text{(X.44)}$$

Ésta es precisamente la probabilidad del estado s para el tiempo t, cuando $\sum_k |a_k|^2 = 1$. En efecto, si denotamos esta probabilidad como $\mathcal{P}_s(t)$, tendremos:

$$\mathcal{P}_s(t) = |\langle s\,|\psi(t)\rangle|^2 = \left|\sum_k a_k \langle s \mid k\rangle\right|^2 = |a_s|^2\,. \quad \text{(X.45)}$$

De esta manera vemos que se cumple que

$$\mathcal{P}_s(t) = \left\langle \hat{P}_s \right\rangle = |\langle s\,|\psi(t)\rangle|^2\,. \quad \text{(X.46)}$$

Una manera alternativa de llegar al mismo resultado a partir de (X.45) es la siguiente:

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_s(t) &= \left|\sum_k a_k \langle s \mid k\rangle\right|^2 = \sum_{k'} a_{k'}^* \langle k \mid s\rangle \sum_k a_k \langle s \mid k\rangle \\ &= \left(\sum_{k'} a_{k'}^* \langle k|\right)|s\rangle\langle s|\left(\sum_k a_k |k\rangle\right) = \langle\psi(t)\,|s\rangle\langle s|\,\psi(t)\rangle = \left\langle \hat{P}_s \right\rangle. \end{aligned} \quad \text{(X.47)}$$

X.9 Demuestre que $\hat{A}(1)\otimes\hat{B}(2)=\hat{A}_{\mathcal{H}}(1)\,\hat{B}_{\mathcal{H}}(2)$, donde $\mathcal{H}=\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$ y $\hat{A}(1)$, $\hat{B}(2)$ operan sobre los espacios de Hilbert $\mathcal{H}_1$ y $\mathcal{H}_2$, respectivamente.

La ecuación (T10.10),

$$\hat{A}_{\mathcal{H}}(1)=\hat{A}(1)\otimes\mathbb{I}(2),\quad \hat{B}_{\mathcal{H}}(2)=\mathbb{I}(1)\otimes\hat{B}(2), \tag{X.48}$$

define la extensión de los operadores $\hat{A}(1)$ y $\hat{B}(2)$ al espacio producto $\mathcal{H}$. En este espacio se tiene

$$\begin{aligned}\hat{A}_{\mathcal{H}}(1)\,\hat{B}_{\mathcal{H}}(2)\,|\psi(1)\,\phi(2)\rangle &= \hat{A}(1)\left[\mathbb{I}(1)\otimes\hat{B}(2)\right]|\psi(1)\rangle\otimes|\phi(2)\rangle\\ &= \hat{A}(1)\,|\psi(1)\rangle\otimes\hat{B}(2)\,|\phi(2)\rangle\\ &= \left[\hat{A}(1)\otimes\hat{B}(2)\right]|\psi(1)\,\phi(2)\rangle,\end{aligned}$$

de donde sigue

$$\hat{A}(1)\otimes\hat{B}(2)=\hat{A}_{\mathcal{H}}(1)\,\hat{B}_{\mathcal{H}}(2). \tag{X.49}$$

X.10 Demuestre que $\left[\hat{A}_{\mathcal{H}}(1),\hat{B}_{\mathcal{H}}(2)\right]=0$, donde la notación es la misma que en el problema anterior. *Sugerencia*: compruebe que $\hat{A}_{\mathcal{H}}(1)\,\hat{B}_{\mathcal{H}}(2)$ y $\hat{B}_{\mathcal{H}}(2)\,\hat{A}_{\mathcal{H}}(1)$ dan el mismo resultado cuando actúan sobre cualquier elemento de la base formada por el producto tensorial $|u_k(1)\rangle\otimes|v_l(2)\rangle$.

Partimos de la definición del producto tensorial de los vectores de estado dada en la sección 10.2 del texto: si cada vector de estado se expresa en su propio espacio en la forma $|\psi(1)\rangle=\sum_k a_k|u_k(1)\rangle$ y $|\varphi(2)\rangle=\sum_k b_k|v_k(2)\rangle$, el producto tensorial es

$$|\psi(1)\rangle\otimes|\varphi(2)\rangle=\sum_{k,l}c_{kl}\,|u_k(1)\rangle\,|v_l(2)\rangle,\quad c_{kl}=a_kb_l. \tag{X.50}$$

Podemos escribir entonces

$$\begin{aligned}\hat{A}_{\mathcal{H}}(1)\,\hat{B}_{\mathcal{H}}(2)\,|\psi(1)\,\phi(2)\rangle &= \hat{A}_{\mathcal{H}}(1)\,\hat{B}_{\mathcal{H}}(2)\sum_{k,l}c_{kl}\,|u_k(1)\rangle\,|v_l(2)\rangle\\ &= \sum_{k,l}c_{kl}\hat{A}(1)\,|u_k(1)\rangle\,\hat{B}(2)\,|v_l(2)\rangle.\end{aligned} \tag{X.51}$$

A su vez,

$$\begin{aligned}\hat{B}_{\mathcal{H}}(2)\,\hat{A}_{\mathcal{H}}(1)\,|\psi(1)\,\phi(2)\rangle &= \hat{B}_{\mathcal{H}}(2)\,\hat{A}_{\mathcal{H}}(1)\sum_{k,l}c_{kl}\,|u_k(1)\rangle\,|v_l(2)\rangle\\ &= \sum_{k,l}c_{kl}\hat{A}(1)\,|u_k(1)\rangle\,\hat{B}(2)\,|v_l(2)\rangle.\end{aligned} \tag{X.52}$$

Comparando ambos resultados se obtiene

$$\hat{A}_{\mathcal{H}}(1)\,\hat{B}_{\mathcal{H}}(2)\,|\psi(1)\,\phi(2)\rangle=\hat{B}_{\mathcal{H}}(2)\,\hat{A}_{\mathcal{H}}(1)\,|\psi(1)\,\phi(2)\rangle, \tag{X.53}$$

y como esto ocurre para todos los vectores, sigue que

$$\left[\hat{A}_{\mathcal{H}}(1),\hat{B}_{\mathcal{H}}(2)\right]=0. \tag{X.54}$$

X.11 Demuestre que el proyector sobre el vector producto tensorial dado por $\mid \psi(1)\,\phi(2)\rangle$ es $\mid \psi(1)\rangle\langle\psi(1)\mid \otimes \mid \phi(2)\rangle\langle\phi(2)\mid$.

Consideremos un estado arbitrario en $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\infty \otimes \mathcal{H}_\in$,

$$|\Phi\rangle = \sum_{k,l} c_{kl}\,|u_k(1)\rangle\,|v_l(2)\rangle\,. \tag{X.55}$$

Empleando el desarrollo de $\mid \psi(1)\rangle$ y $\mid \phi(2)\rangle$ usado en el problema X.10, obtenemos

$$\begin{aligned}\mid \psi(1)\rangle\langle\psi(1)\mid \otimes \mid \phi(2)\rangle\,\langle\phi(2)\mid \Phi\rangle = \\ &= \sum_{k,l} c_{kl}\mid \psi(1)\rangle\,\langle\psi(1)\mid u_k(1)\rangle \otimes \mid \phi(2)\rangle\,\langle\phi(2)\mid v_l(2)\rangle \\ &= \sum_{k,l} c_{kl}a_k^* b_l^*\mid \psi(1)\rangle\otimes\mid \phi(2)\rangle = \sum_{k,l} c_{kl}a_k^* b_l^*\mid \psi(1)\,\phi(2)\rangle.\end{aligned} \tag{X.56}$$

Este resultado muestra que en efecto $\mid \psi(1)\rangle\langle\psi(1)\mid \otimes \mid \phi(2)\rangle\,\langle\phi(2)|$ proyecta un estado arbitrario $|\Phi\rangle$ sobre el vector producto tensorial dado por $\mid \psi(1)\,\phi(2)\rangle$.

X.12 Demuestre que en la representación de momentos la función $A(\mathbf{r})/r$ se transforma en

$$\frac{1}{2\pi^2\hbar}\int \frac{A(\mathbf{p}')}{(\mathbf{p}-\mathbf{p}')^2}\,d\mathbf{p}'.$$

Introducimos la notación

$$f(\mathbf{r}) = \frac{A(\mathbf{r})}{r}. \tag{X.57}$$

La representación de esta función en el espacio de momentos es la transformada de Fourier

$$\widetilde{f}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \frac{A(\mathbf{r})}{r}e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}d^3r. \tag{X.58}$$

Por otra parte, se puede escribir

$$A(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int A\left(\mathbf{p}'\right)e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar}d^3p', \tag{X.59}$$

que sustituida en la expresión anterior da

$$\widetilde{f}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\int \frac{A(\mathbf{p}')}{r}e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}/\hbar}d^3r\,d^3p'. \tag{X.60}$$

La integral sobre el espacio $\mathbf{r}$ puede realizarse fácilmente usando coordenadas esféricas y da

$$\begin{aligned}\int \frac{e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{r}\,d^3r &= 2\pi\int_0^\infty rdr\int_{-1}^1 dx e^{i|\mathbf{p}'-\mathbf{p}|rx/\hbar} \\ &= \frac{4\pi\hbar^2}{|\mathbf{p}'-\mathbf{p}|^2}.\end{aligned} \tag{X.61}$$

Así pues,

$$\widetilde{f}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2\pi^2\hbar}\int \frac{A(\mathbf{p}')}{|\mathbf{p}'-\mathbf{p}|^2}d^3p', \tag{X.62}$$

que es el resultado solicitado.

X.2. Problemas adicionales

X.13 El hamiltoniano de un cierto sistema tiene la forma diagonal N-dimensional

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & \vdots & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & \vdots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \ddots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & 0 & E_N \end{pmatrix}.$$

Investigue bajo qué condiciones el sistema retorna al mismo estado después de un tiempo T.

Consideremos el vector de estado para el tiempo $t = 0$, que escribimos en la forma

$$|\psi(0)\rangle = \sum_k a_k |E_k\rangle . \tag{X.63}$$

Un tiempo t después este vector de estado vale

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k a_k e^{-iE_k t/\hbar} |E_k\rangle . \tag{X.64}$$

La condición de retorno al mismo estado después de un tiempo T es entonces, con φ una fase constante libre,

$$\sum_k a_k |E_k\rangle = e^{i\varphi} \sum_k a_k e^{-iE_k T/\hbar} |E_k\rangle ,$$

es decir

$$\sum_k a_k |E_k\rangle \left(e^{i(\varphi - E_k T/\hbar)} - 1 \right) = 0. \tag{X.65}$$

Tomando $\varphi = E_l T/\hbar$, donde E_l es alguno de los eigenvalores del hamiltoniano, la condición anterior se reduce a

$$e^{i(E_l - E_k)T/\hbar} = 1, \tag{X.66}$$

para toda k, e implica que todas las diferencias de energías deben ser conmensurables entre sí, esto es, que debe cumplirse

$$|E_l - E_k| = E_0 n_{lk}, \tag{X.67}$$

con n_{lk} entero y $E_0 = 2\pi\hbar/T$.

Cuando esta condición se satisface para una l dada y toda k, se satisface para toda l, k. Cuanto menor es el valor de E_0, mayor es el período T; el límite $E_0 \to 0$ expresa la inconmensurabilidad de las diferencias de energías y la falta de periodicidad del sistema.

* **X.14** Considere dos variables dinámicas cuyos operadores tienen el conmutador $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\gamma\mathbb{I}$, con $\gamma > 0$. Estudie las propiedades generales de estos operadores. En particular, demuestre que el espectro de al menos uno de ellos es continuo y no acotado.

La constante que aparece en el conmutador es poco significativa, pues una redefinición de cualquiera de las dos variables permite asignarle cualquier valor finito $\neq 0$; sin embargo, la seguiremos manteniendo explícita, por razones de conveniencia. Consideremos dos observables que satisfacen la relación, característica de las variables canónicas conjugadas,

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\gamma\mathbb{I}. \tag{X.68}$$

Definimos un operador unitario $\hat{S}(\lambda)$ que depende de un parámetro real λ, en la forma

$$\hat{S}(\lambda) = e^{-i\lambda\hat{B}/\gamma}. \tag{X.69}$$

Este operador tiene las propiedades

$$\hat{S}^{\dagger}(\lambda) = \hat{S}^{-1}(\lambda) = \hat{S}(-\lambda), \tag{X.70}$$

$$\hat{S}(\lambda_1)\hat{S}(\lambda_2) = \hat{S}(\lambda_1 + \lambda_2). \tag{X.71}$$

Con ayuda de la fórmula (IX.27) escribimos

$$\left[\hat{A}, \hat{S}(\lambda)\right] = i\gamma\frac{\partial\hat{S}(\lambda)}{\partial\hat{B}} = \lambda\hat{S}(\lambda), \tag{X.72}$$

es decir,

$$\hat{A}\hat{S}(\lambda) = \hat{S}(\lambda)\left[\hat{A} + \lambda\right]. \tag{X.73}$$

Suponemos ahora que existe al menos un estado propio de $\hat{A}$, con valor propio a, de tal forma que

$$\hat{A}\left|a\right\rangle = a\left|a\right\rangle. \tag{X.74}$$

Aplicando la ecuación anterior a este ket se obtiene

$$\hat{A}\hat{S}(\lambda)\left|a\right\rangle = \hat{S}(\lambda)\left(\hat{A} + \lambda\right)\left|a\right\rangle = (a + \lambda)\,\hat{S}(\lambda)\left|a\right\rangle, \tag{X.75}$$

que muestra que también $\hat{S}(\lambda)\left|a\right\rangle$ es eigenvector de $\hat{A}$, con valor propio $a + \lambda$. Como λ puede tomar cualquier valor real, el espectro de $\hat{A}$ es continuo. Es muy conveniente fijar la fase de los vectores propios de $\hat{A}$ con referencia al vector propio $|0\rangle$; esto puede hacerse escribiendo

$$\left|a\right\rangle = \hat{S}(a)\left|0\right\rangle, \tag{X.76}$$

pues de aquí y (X.71) resulta

$$\hat{S}(\lambda)\left|a\right\rangle = \hat{S}(\lambda)\hat{S}(a)\left|0\right\rangle = \hat{S}(\lambda + a)\left|0\right\rangle = \left|a + \lambda\right\rangle. \tag{X.77}$$

Consideremos ahora un ket $|\psi\rangle$; en la representación a tenemos

$$\psi(a) = \left\langle a\right|\left.\psi\right\rangle. \tag{X.78}$$

Para el ket $\hat{A}\left|\psi\right\rangle$ se obtiene, usando la adjunta de (X.74),

$$\left\langle a\right|\hat{A}\left|\psi\right\rangle = a\left\langle a\right|\left.\psi\right\rangle = a\psi(a). \tag{X.79}$$

A su vez, la función de onda en la representación a del ket $\hat{S}(\lambda)\,|\psi\rangle$ es (se usan la adjunta de (X.77) y (X.70))

$$\langle a|\,\hat{S}(\lambda)\,|\psi\rangle = \langle a-\lambda|\;\psi\rangle = \psi(a-\lambda). \tag{X.80}$$

Vemos que la acción del operador $\hat{S}(\lambda)$ en la representación a es generar la traslación de la función de onda sobre la "distancia" λ paralela al eje a. Luego, $\hat{S}(\lambda)$ es el *operador de desplazamiento o de traslaciones* (cf. la discusión en la sección 9.6 del texto).

Estudiamos ahora la acción de $\hat{B}$ en la representación a. Para $\lambda = -\varepsilon$, con ε un infinitesimal, podemos escribir, desarrollando la ecuación (X.69) a primer orden,

$$\hat{S}(-\varepsilon) = 1 + \frac{i\varepsilon}{\gamma}\hat{B}. \tag{X.81}$$

De aquí, (X.78) y (X.80) se obtiene

$$\langle a|\,\hat{S}(-\varepsilon)\,|\psi\rangle = \psi(a) + \frac{i\varepsilon}{\gamma}\,\langle a|\,\hat{B}\,|\psi\rangle = \psi(a+\varepsilon), \tag{X.82}$$

de donde sigue que

$$\langle a|\,\hat{B}\,|\psi\rangle = -i\gamma \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\psi(a+\varepsilon)-\psi(a)}{\varepsilon} = -i\gamma\frac{d}{da}\psi(a), \tag{X.83}$$

lo que muestra que la acción de $\hat{B}$ en la representación a coincide con la del operador $-i\gamma\,(d/da)$.

Como $\left[\hat{B},\hat{A}\right] = -i\gamma\mathbb{I}$ y γ es un número real arbitrario, todo lo que se ha dicho aquí respecto de $\hat{A}$ se aplica, *mutatis mutandis*, a $\hat{B}$.

X.15 Considere una cadena lineal de n partículas de masa m, ligadas entre sí por fuerzas lineales y colocadas en reposo en las posiciones x_i del eje Ox. Las partículas pueden vibrar sólo sobre el eje ortogonal Oy, con desplazamientos $y_i(t), i = 1, 2, \ldots, n$. Tomamos los números y_i como las componentes de un vector en un espacio de dimensión n. La longitud de este vector se define como

$$y = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} y_i^2}. \tag{A}$$

La distancia entre los extremos de dos vectores $f = \{f_i\}$ y $g = \{g_i\}$ en este espacio se define como la longitud del vector $f - g$, es decir,

$$d_{fg} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (f_i - g_i)^2}. \tag{B}$$

El ángulo ϕ entre los vectores f y g se define mediante la fórmula

$$\cos\phi = \frac{\sum_{i=1}^{n} f_i g_i}{fg}, \tag{C}$$

donde $f = \left(\sum_{i=1}^{n} f_i^2\right)^{1/2}$ y $g = \left(\sum_{i=1}^{n} g_i^2\right)^{1/2}$ representan las longitudes de los vectores f y g, respectivamente. El producto escalar de los vectores f y g se define como

$$(f, g) = \sum_{i=1}^{n} f_i g_i = fg \cos\phi. \qquad \text{(D)}$$

Se dice que los vectores f y g son ortogonales cuando $\cos\phi = 0$, es decir, cuando

$$\sum_{i=1}^{n} f_i g_i = 0. \qquad \text{(E)}$$

Al considerar el límite cuando el número de partículas crece indefinidamente para generar una distribución continua de masa, de tal manera que la cadena discreta de osciladores se transforma en una cuerda vibrante, el número de dimensiones se hace infinito, $n \to \infty$, los puntos discretos x_i se transforman en la variable continua x, $x_i \to x$ (dentro del intervalo ocupado por la cuerda), y cada uno de los vectores se transforma en un *campo*, con un número infinito de componentes, $y_i \to y(x)$. Esta imagen permite considerar la función $y(x)$ que describe la forma instantánea de la cuerda vibrante (o un campo en general) como un vector en un cierto espacio de dimensión infinita. Este espacio, cuyos puntos (vectores) son funciones $\varphi(x)$ en un cierto intervalo, con propiedades similares a las descritas para la cadena finita adecuadamente generalizadas, es un espacio de Hilbert.

Generalice apropiadamente las ecuaciones (A)-(E) anteriores para describir vectores en el espacio de Hilbert.

La longitud del vector $\varphi(x)$ se define[3] por analogía con (A), como

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} \varphi_i^2} \to \sqrt{\int_a^b \varphi^2(x)dx} \equiv \|\varphi\|\,. \qquad \text{(X.84)}$$

Vemos que los vectores de longitud finita corresponden a funciones de cuadrado integrable; cuando esta longitud es igual a 1, el vector φ está normalizado a la unidad.

La distancia entre dos vectores φ_n y φ_m de este espacio es

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (f_i - g_i)^2} \to \sqrt{\int_a^b \left[\varphi_n(x) - \varphi_m(x)\right]^2 dx}. \qquad \text{(X.85)}$$

El ángulo entre los vectores φ_n y φ_m queda dado por la expresión

$$\cos\phi = \frac{\int_a^b \varphi_n(x)\varphi_m(x)dx}{\|\varphi_n\| \cdot \|\varphi_m\|}. \qquad \text{(X.86)}$$

De la desigualdad de Cauchy,

$$\left|\int_a^b f(x)g(x)dx\right|^2 \le \int_a^b f^2(x)dx \int_a^b g^2(x)dx = \|f\| \cdot \|g\|\,, \qquad \text{(X.87)}$$

[3]Por simplicidad, consideramos vectores reales; la generalización al caso complejo es inmediata y conduce a las definiciones usuales en la mecánica cuántica.

sigue que en todos los casos $|\cos\phi| \leq 1$, lo que permite considerar efectivamente a ϕ como un ángulo. El producto escalar de los vectores (diferentes) φ_n y φ_m se debe definir como

$$(\varphi_n, \varphi_m) = \int_a^b \varphi_n(x)\varphi_m(x)dx = \|\varphi_n\| \cdot \|\varphi_m\| \cos\phi. \tag{X.88}$$

Finalmente, los vectores φ_n y φ_m son ortogonales si $(\varphi_n, \varphi_m) = 0$, es decir, si

$$\int_a^b \varphi_n(x)\varphi_m(x)dx = 0, \quad m \neq n. \tag{X.89}$$

Por lo tanto, podemos escribir en general

$$\int_a^b \varphi_n(x)\varphi_m(x)dx = \|\varphi_n\|^2 \delta_{nm}. \tag{X.90}$$

Concluimos que las funciones $f(x)$ para las cuales $\int_a^b f^2(x)dx$ tiene sentido, es decir, las funciones de cuadrado integrable pueden ser consideradas como vectores en un espacio de Hilbert. Esta integral puede interpretarse, en general, tanto en el sentido de Riemann (para funciones continuas) como en el de Lebesgue. La discusión anterior también pone en evidencia que el uso de un espacio de Hilbert en un problema físico no es necesariamente indicio de cuantización. Por ejemplo, en problemas clásicos de vibración de cuerdas o membranas, o de cargas eléctricas, o más en general, en cualquier situación en que de manera natural pueda describirse un movimiento o fenómeno en términos de los conjuntos de funciones $\{\operatorname{sen} q_0 nx\}$, $\{\cos q_0 nx\}$, $n \in Z$, a través de desarrollos de Fourier, se hace uso de un espacio de Hilbert, sin que ello implique ninguna forma de cuantización. Sin embargo, es en relación con los sistemas cuánticos donde el análisis en los términos propios y naturales de los espacios de Hilbert resulta particularmente bien adaptado a la descripción física.

X.16 Demuestre que si $|\psi(t)\rangle$ es una eigenfunción del observable $\hat{A}$ con eigenvalor a para $t = 0$, entonces para $t > 0$, $|\psi(t)\rangle$ es eigenfunción del operador $\hat{A}_H(-t)$ con el mismo eigenvalor a.

Tomando $t_0 = 0$ y escribiendo $\hat{U}(t, t_0 = 0) = \hat{U}(t)$, el operador $\hat{A}$ para el tiempo t en la descripción de Heisenberg es

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0)\, \hat{A}\hat{U}(t, t_0). \tag{X.91}$$

A su vez, el vector de estado para el tiempo t en la descripción de Schrödinger es

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,|\psi(0)\rangle = \hat{U}(t)\,|\psi_H\rangle. \tag{X.92}$$

Como por hipótesis, en $t = 0$ el estado $|\psi(t)\rangle$ es eigenfunción del operador $\hat{A}$, se cumple que

$$\hat{A}\,|\psi(0)\rangle = a\,|\psi(0)\rangle. \tag{X.93}$$

Con ayuda de (X.92) esta condición se puede reexpresar en la forma

$$\hat{A}\hat{U}^\dagger(t)\,|\psi(t)\rangle = a\hat{U}^\dagger(t)\,|\psi(t)\rangle, \tag{X.94}$$

la que, multiplicada por la izquierda por $\hat{U}(t)$, da

$$\hat{U}(t)\,\hat{A}\hat{U}^{\dagger}(t)\,|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,a\hat{U}^{\dagger}(t)\,|\psi(t)\rangle\,. \tag{X.95}$$

Finalmente, usamos (X.91) y la propiedad $\hat{U}^{\dagger}(t) = \hat{U}(-t)$ para escribir el resultado en la forma

$$\hat{A}_H(-t)\,|\psi(t)\rangle = a\,|\psi(t)\rangle\,, \tag{X.96}$$

que muestra que $|\psi(t)\rangle$ es eigenfunción de $\hat{A}_H(-t)$ con el mismo eigenvalor a.

X.17 Una partícula se encuentra en un estado estacionario en una caja unidimensional impenetrable de longitud L. Las paredes de la caja se retiran bruscamente en $t = 0$, de tal forma que la partícula pueda moverse libremente para $t > 0$. ¿Cuál es la probabilidad de que el momento de la partícula se encuentre entre p y $p + dp$ para $t > 0$?

Supongamos que para $t < 0$, la partícula se encuentra en el eigenestado $\varphi_n(x)$, ecuación (T3.31), al que corresponde la energía

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2mL^2}. \tag{X.97}$$

Para $t = 0$ podemos escribir

$$\psi_n(x,0) = \begin{cases} \sqrt{2/L}\,\operatorname{sen}(\pi n x/L)\,, & 0 \le x \le L; \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases} \tag{X.98}$$

Después de que las paredes se han retirado, la partícula es libre y la función de onda que la describe en el espacio de momentos es de la forma

$$\phi(p,t) = \phi(p)\,e^{-ip^2 t/2m\hbar}, \tag{X.99}$$

donde

$$\phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,t)\,e^{-ipx/\hbar}\,dx. \tag{X.100}$$

En particular,

$$\phi(p,0) \equiv \phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,0)\,e^{-ipx/\hbar}\,dx. \tag{X.101}$$

Sustituyendo la condición inicial (X.98) queda

$$\begin{aligned} \phi_n(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{2}{L}}\int_0^L \operatorname{sen}\frac{\pi n x}{L}e^{-ipx/\hbar}\,dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar L}}\left(\int_0^L \operatorname{sen}\frac{\pi n x}{L}\cos\frac{px}{\hbar}\,dx - i\int_0^L \operatorname{sen}\frac{\pi n x}{L}\operatorname{sen}\frac{px}{\hbar}\,dx\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi\hbar L}}\frac{\pi n/L}{(\pi n\hbar/L)^2 - p^2}\left[1 - (-1)^n e^{-ipL/\hbar}\right]. \end{aligned} \tag{X.102}$$

En términos del momento p_n de la partícula con energía E_n, definido como

$$p_n = \frac{\pi n\hbar}{L} = \sqrt{2mE_n}, \tag{X.103}$$

la expresión anterior toma la forma

$$\phi_n(p) = -\sqrt{\frac{\hbar}{\pi L}}\frac{p_n}{p^2-p_n^2}\left[1-(-1)^n e^{-ipL/\hbar}\right]. \tag{X.104}$$

Con esto la función de onda completa en el espacio de momentos para $t > 0$ resulta (hasta un factor de fase global irrelevante)

$$\phi_n(p,t) = -\sqrt{\frac{\hbar}{\pi L}}\frac{p_n}{p^2-p_n^2}\left[1-(-1)^n e^{-ipL/\hbar}\right] e^{-ip^2t/2m\hbar}. \tag{X.105}$$

La probabilidad de que la partícula tenga un momento entre p y $p+dp$ para $t>0$ es

$$\begin{aligned}|\phi_n(p)|^2 dp &= \frac{\hbar}{\pi L}\frac{p_n^2}{(p^2-p_n^2)^2}\left|1-(-1)^n e^{-ipL/\hbar}\right|^2 dp \\ &= \frac{2\hbar}{\pi L}\frac{p_n^2}{(p^2-p_n^2)^2}\left[1-(-1)^n\cos\frac{pL}{\hbar}\right]dp. \end{aligned}\tag{X.106}$$

Para n grande, esta distribución tiene un máximo en $p=\pm p_n$, lo que concuerda con el caso clásico.

En particular, si el sistema se encontraba en $t=0$ en su estado base, la probabilidad de que tenga un momento comprendido en el intervalo $[p, p+dp]$ después de removidas las paredes es

$$|\phi_1(p)|^2 dp = \frac{4\hbar}{\pi L}\frac{p_1^2}{\left(p^2-p_1^2\right)^2}\cos^2\frac{Lp}{2\hbar}dp, \tag{X.107}$$

con $p_1 = \pi\hbar/L$.

X.18 Una partícula se mueve en un campo de fuerzas uniforme F. Construya detalladamente los estados estacionarios $\Psi(p)$ y utilícelos para obtener la correspondiente función de onda en el espacio de configuración.

La ecuación estacionaria de Schrödinger en el espacio de configuración aplicable al problema es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - Fx\psi(x) = E\psi(x). \tag{X.108}$$

Para obtener la correspondiente expresión en el espacio momental multiplicamos la ecuación (X.108) por $e^{-ipx/\hbar}$ e integramos sobre todo el espacio de configuración:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}e^{-ipx/\hbar}dx - F\int_{-\infty}^{\infty}x\psi(x)e^{-ipx/\hbar}dx = E\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-ipx/\hbar}dx. \tag{X.109}$$

Integrando dos veces, por partes, el primer término y escribiendo

$$xe^{-ipx/\hbar} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}e^{-ipx/\hbar} \tag{X.110}$$

en el segundo término, se obtiene

$$\frac{p^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-ipx/\hbar}\,dx - i\hbar F\frac{\partial}{\partial p}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-ipx/\hbar}\,dx = E\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-ipx/\hbar}\,dx. \tag{X.111}$$

Usando la ecuación (X.15) para introducir la función de onda en el espacio de momentos, con $\Psi(p) = \tilde{\psi}(p)$, la ecuación de Schrödinger en este espacio resulta (cf. ecuación (T10.34))

$$\frac{p^2}{2m}\Psi(p) - i\hbar F\frac{\partial}{\partial p}\Psi(p) = E\Psi(p), \tag{X.112}$$

o bien, rearreglando,

$$\frac{d\Psi(p)}{dp} + \frac{i}{\hbar F}\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)\Psi(p) = 0. \tag{X.113}$$

La solución de (X.112) con eigenvalor E es

$$\Psi_E(p) = C\exp\left[-\frac{i}{\hbar F}\left(\frac{p^3}{6m} - Ep\right)\right], \tag{X.114}$$

con C la constante de normalización, que se determina de la condición

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*_{E'}(p)\Psi_E(p)dp = \delta\left(E - E'\right). \tag{X.115}$$

Tomando a C como real, se obtiene

$$C^2\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[\frac{i}{\hbar F}\left(E - E'\right)p\right]\,dp = 2\pi\hbar F C^2\delta\left(E - E'\right) = \delta\left(E - E'\right),$$

o sea

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}}. \tag{X.116}$$

Con esto, los estados estacionarios de la partícula en el espacio de momentos resultan

$$\Psi_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}}\exp\left[-\frac{i}{\hbar F}\left(\frac{p^3}{6m} - Ep\right)\right]. \tag{X.117}$$

La función de onda en el espacio de configuración correspondiente a $\Psi_E(p)$ está dada por la transformada inversa de Fourier de (X.15),

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(p)\,e^{ipx/\hbar}\,dp. \tag{X.118}$$

Insertando aquí (X.117) se obtiene

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi\hbar\sqrt{F}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{i}{\hbar F}\left(\frac{p^3}{6m} - (E + xF)\,p\right)\right]\,dp. \tag{X.119}$$

Con el cambio de variable

$$u = -\left(2m\hbar F\right)^{-1/3} p \tag{X.120}$$

esta expresión puede reescribirse como

$$\begin{aligned}\psi\left(x\right) &= \frac{1}{2\pi\sqrt{F}}\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[i\left(\frac{u^3}{3}-\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(\frac{E}{F}+x\right)u\right)\right]du \\ &= \frac{1}{\pi\sqrt{F}}\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3}\int_{0}^{\infty}\cos\left(\frac{u^3}{3}-\zeta u\right)du, \end{aligned} \tag{X.121}$$

con

$$\zeta = \left(\frac{E}{F}+x\right)\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3}. \tag{X.122}$$

Con ayuda de las funciones de Airy, definidas como

$$\mathrm{Ai}\left[\pm\left(3a\right)^{-1/3}x\right] = \int_{-\infty}^{\infty}\cos\left(at^3 \pm xt\right)dt, \tag{X.123}$$

se obtiene finalmente

$$\psi\left(x\right) = \frac{1}{\pi\sqrt{F}}\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3}\mathrm{Ai}\left[-\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(\frac{E}{F}+x\right)\right]. \tag{X.124}$$

El caso particular de este problema, aplicado a una partícula inmersa en un campo gravitacional uniforme, se estudia en el problema V.13 (cf. ecuación (V.85)). La ecuación (X.124) es útil también en el método WKB, porque representa la $\psi\left(x\right)$ en la vecindad de los puntos de retorno x_0, donde $V(x) - E \simeq xV'(x_0) = -xF(x_0)$; ésta $\psi\left(x\right)$ es la que se empata (o "cose") a ambos lados de los puntos de retorno con las soluciones obtenidas con el método WKB lejos de ellos (véase la sección T7.1 y ejercicio X.33).

X.19 Determine la regla de transformación de la función de onda en el espacio momental frente a una transformación de Galileo.

Como se estudia en el problema V.14, ante la transformación de Galileo

$$x' = x - vt, \quad t' = t \tag{X.125}$$

la función de onda en el espacio de configuración se transforma según la regla

$$\psi\left(x,t\right) = e^{ig(x,t)}\psi'\left(x',t'\right), \tag{X.126}$$

donde

$$g\left(x,t\right) = \frac{mvx}{\hbar} - \frac{mv^2t}{2\hbar}. \tag{X.127}$$

En el espacio de momentos la función de onda está dada por la ecuación (X.15), o sea

$$\Psi\left(p,t\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi\left(x,t\right)e^{-ipx/\hbar}\,dx. \tag{X.128}$$

Insertando aquí (X.126), resulta

$$\begin{aligned}\Psi(p,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi'(x',t')\exp\left(\frac{imvx}{\hbar}-\frac{imv^2t}{2\hbar}-\frac{ipx}{\hbar}\right)dx,\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi'(x',t')\exp\left[\frac{imvx'}{\hbar}+\frac{imv^2t}{2\hbar}-\frac{ipx'}{\hbar}-\frac{ipvt}{\hbar}\right]dx'\\ &= \exp\left[\left(\frac{imv^2}{2\hbar}-\frac{ipv}{\hbar}\right)t\right]\\ &\quad\times\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi'(x',t')\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(p-mv)x'\right]dx'. \qquad \text{(X.129)}\end{aligned}$$

Comparando con (X.128), vemos que este resultado puede escribirse en la forma

$$\Psi(p,t)=\exp\left[\left(\frac{imv^2}{2\hbar}-\frac{ipv}{\hbar}\right)t\right]\Psi(p-mv,t), \qquad \text{(X.130)}$$

de donde sigue que la regla de transformación de la función de onda momental ante transformaciones de Galileo es

$$\Psi(p,t)=e^{iG(p,t)}\Psi'(p',t'), \qquad \text{(X.131)}$$

con

$$G(p,t)=-\frac{pt}{\hbar}v+\frac{mv^2t}{2\hbar},\quad p'=p-mv. \qquad \text{(X.132)}$$

X.20 Construya el operador unitario que realiza la transformación $\hat{x}\to\hat{p}$ y $\hat{p}\to-\hat{x}$, la cual deja invariante al operador $\hat{x}^2+\hat{p}^2$.

Para simplificar la solución, consideraremos que $\hat{x}$ y $\hat{p}$ están dados en las mismas unidades. Queremos construir una transformación unitaria $\hat{U}$, tal que

$$\hat{U}\hat{x}\hat{U}^\dagger=\hat{p} \qquad \text{(X.133)}$$

y

$$\hat{U}\hat{p}\hat{U}^\dagger=-\hat{x}. \qquad \text{(X.134)}$$

De estas expresiones sigue de inmediato que

$$\hat{U}\hat{x}^2\hat{U}^\dagger=\hat{U}\hat{x}\hat{x}\hat{U}^\dagger=\hat{U}\hat{x}\hat{U}^\dagger\hat{U}\hat{x}\hat{U}^\dagger=\hat{p}^2, \qquad \text{(X.135)}$$

$$\hat{U}\hat{p}^2\hat{U}^\dagger=\hat{U}\hat{p}\hat{U}^\dagger\hat{U}\hat{p}\hat{U}^\dagger=\hat{x}^2. \qquad \text{(X.136)}$$

De aquí sigue, en particular, que el operador $\hat{A}$ definido como

$$\hat{A}=\tfrac{1}{2}\left(\hat{x}^2+\hat{p}^2\right) \qquad \text{(X.137)}$$

es invariante frente a la transformación con $\hat{U}$,

$$\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger=\hat{A}. \qquad \text{(X.138)}$$

Como $\hat{x}$ y $\hat{p}$ son operadores hermitianos, $\hat{A}$ también es hermitiano; en particular, se le puede interpretar como el hamiltoniano de un oscilador armónico unidimensional con $m=\omega=1$; en otras palabras, (X.138) describe una simetría del oscilador armónico.

Para obtener una expresión explícita para $\hat{U}$ proponemos buscarla de la forma

$$\hat{U} = e^{i\theta\hat{G}/\hbar}, \tag{X.139}$$

con $\hat{G}$ un operador hermitiano y θ una fase a determinar. Observemos que si $\hat{U}$ es una función de $\hat{A}$, $\hat{U} = f\left(\hat{A}\right)$, entonces la condición (X.138) se satisface automáticamente, pues

$$f\left(\hat{A}\right)\hat{A}f^{\dagger}\left(\hat{A}\right) = \hat{A}f\left(\hat{A}\right)f^{\dagger}\left(\hat{A}\right) = \hat{A}\hat{U}\hat{U}^{\dagger} = \hat{A}. \tag{X.140}$$

La posibilidad más simple consiste en tomar $\hat{G} = \hat{A}$; vamos a verificar que ella resuelve el problema. Ponemos

$$\hat{U} = e^{i\theta\hat{A}/\hbar}, \quad \hat{U}^{\dagger} = e^{-i\theta\hat{A}/\hbar}. \tag{X.141}$$

Utilizando la identidad

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \left[\hat{A},\hat{B}\right] + \frac{1}{2!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] + \frac{1}{3!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]\right] + \cdots, \tag{X.142}$$

se obtiene

$$\begin{aligned}\hat{U}\hat{x}\hat{U}^{\dagger} &= e^{i\theta\hat{A}/\hbar}\hat{x}e^{-i\theta\hat{A}/\hbar}\\ &= \hat{x} + \frac{i\theta}{\hbar}\left[\hat{A},\hat{x}\right] + \frac{1}{2!}\left(\frac{i\theta}{\hbar}\right)^2\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{x}\right]\right]\\ &\quad + \frac{1}{3!}\left(\frac{i\theta}{\hbar}\right)^3\left[\hat{A},\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{x}\right]\right]\right] + \cdots\end{aligned} \tag{X.143}$$

Como

$$\left[\hat{A},\hat{x}\right] = \tfrac{1}{2}\left[\hat{x}^2 + \hat{p}^2,\hat{x}\right] = -i\hbar\hat{p} \tag{X.144}$$

y

$$\left[\hat{A},\hat{p}\right] = \tfrac{1}{2}\left[\hat{x}^2 + \hat{p}^2,\hat{p}\right] = i\hbar\hat{x}, \tag{X.145}$$

(X.143) puede reescribirse como

$$\begin{aligned}\hat{U}\hat{x}\hat{U}^{\dagger} &= \hat{x} + \theta\hat{p} - \frac{\theta^2}{2}\hat{x} - \frac{\theta^3}{3!}\hat{p} + \cdots\\ &= \hat{x}\left(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} + \cdots\right) + \hat{p}\left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} + \cdots\right)\\ &= \hat{x}\cos\theta + \hat{p}\,\mathrm{sen}\,\theta.\end{aligned} \tag{X.146}$$

De forma completamente análoga se obtiene

$$\begin{aligned}\hat{U}\hat{p}\hat{U}^{\dagger} &= e^{i\theta\hat{A}/\hbar}\hat{p}e^{-i\theta\hat{A}/\hbar}\\ &= \hat{p} + \frac{i\theta}{\hbar}\left[\hat{A},\hat{p}\right] + \frac{1}{2!}\left(\frac{i\theta}{\hbar}\right)^2\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{p}\right]\right] + \frac{1}{3!}\left(\frac{i\theta}{\hbar}\right)^3\left[\hat{A},\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{p}\right]\right]\right] + \cdots\\ &= \hat{p} - \theta\hat{x} - \frac{\theta^2}{2}\hat{p} + \frac{\theta^3}{3!}\hat{x} + \cdots\\ &= \hat{p}\left(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} + \cdots\right) + \hat{x}\left(-\theta + \frac{\theta^3}{3!} - \frac{\theta^5}{5!} + \cdots\right)\\ &= \hat{p}\cos\theta - \hat{x}\,\mathrm{sen}\,\theta.\end{aligned} \tag{X.147}$$

Como las expresiones (X.146) y (X.147) satisfacen las condiciones (X.133) y (X.134) para $\theta = \pi/2$, la transformación buscada es

$$\hat{U} = \exp\left[\frac{i\pi}{4\hbar}\left(\hat{x}^2 + \hat{p}^2\right)\right]. \tag{X.148}$$

X.3. Ejercicios

X.21 Determine las propiedades de los operadores producto $\hat{S}_k\hat{S}_l$, donde $\hat{S}_k$ se definen en el problema X.7.

X.22 Demuestre que si $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = i\alpha\mathbb{I}$ con $\alpha \neq 0$, la dimensión del espacio de Hilbert es necesariamente infinita. En otras palabras, que en un espacio de Hilbert de dimensión finita no existe una pareja de observables cuyo conmutador sea igual a $i\times$ const. *Observaciones*: Nótese que éste es precisamente el caso de los operadores $\hat{x}$ y $\hat{p}$. Como se ve en el problema X.14, puede demostrarse también que al menos uno de los dos operadores involucrados es no acotado.

X.23 Utilice la ecuación (X.83) para construir de manera explícita la función de onda $\varphi_b(a)$ que corresponde a la representación a de un vector propio $|b\rangle$ de $\hat{B}$ con valor propio b. Demuestre que $\langle a|\,\psi\rangle$ y $\langle b|\,\psi\rangle$ se relacionan mediante una transformación de Fourier.

X.24 Demuestre la *fórmula de Zassenhauss*

$$e^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)} = e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}e^{\lambda^2\hat{C}_2}e^{\lambda^3\hat{C}_3}\cdots$$

en donde

$$\hat{C}_2 = -\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right], \quad \hat{C}_3 = \frac{1}{3}\left[\hat{B},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] + \frac{1}{6}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right],\ldots$$

Sugerencia: haga uso reiterado de la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff.

X.25 Demuestre la *identidad de Kubo*

$$\left[\hat{A},e^{-\alpha\hat{B}}\right] = e^{-\alpha\hat{B}}\int_0^\alpha e^{\lambda\hat{B}}\left[\hat{A},\hat{B}\right]e^{-\lambda\hat{B}}\,d\lambda.$$

X.26 Dada la función de onda

$$\psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\alpha x^2/2},$$

determine la función de onda en el espacio de momentos y úsela para calcular $\langle p^n\rangle$ y Δp. ¿Cuál es la probabilidad de que el momento de la partícula esté comprendido entre p y $p+dp$?

X.27 Determine la función de onda en el espacio de momentos para partículas en un pozo de potencial unidimensional cuadrado infinito.

X.28 Considere la función de onda $\phi(p)$ de una partícula en el espacio momental. Si esta función difiere de cero sólo para valores positivos de p, ¿qué condiciones debe satisfacer para que $\hat{x}$ sea un operador hermitiano?

X.29 Dado un paquete de onda inicial $\phi_0(p) = \phi(p,t=0)$, determine $\phi(p,t)$ para el problema X.18. Construya primero el propagador en el espacio de momentos $K(p,t,p',t')$.

X.30 Encuentre una expresión para el operador $\hat{x}^{-1}$ en el espacio de momentos para el caso unidimensional.

X.31 Considere un potencial local descrito por un operador $\hat{W}$ cuya matriz en la representación de coordenadas es diagonal, $\left\langle \mathbf{x} \left| \hat{W} \right| \mathbf{x}' \right\rangle = W(\mathbf{x})\,\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$. ¿Qué propiedad corresponde al elemento de matriz general $\left\langle \mathbf{p} \left| \hat{W} \right| \mathbf{p}' \right\rangle$ en el espacio de momentos?

X.32 Sea $\hat{K} = |\varphi\rangle\langle\psi|$, con $|\varphi\rangle$ y $|\psi\rangle$ dos eigenfunciones apropiadas.

a) ¿Bajo qué condiciones $\hat{K}$ es hermitiano?

b) Calcule $\hat{K}^2$. ¿Bajo qué condiciones $\hat{K}$ es un proyector?

c) Demuestre que $\hat{K}$ siempre puede escribirse en la forma $\hat{K} = \lambda \hat{P}_1 \hat{P}_2$, con λ una constante y $\hat{P}_1$ y $\hat{P}_2$ proyectores. ¿Cuál es el valor de λ?

X.33 Utilice la ecuación (X.124) para derivar las fórmulas de conexión del método WKB en la vecindad de un punto de retorno (T7.22) y (T7.23).

XI. El oscilador armónico unidimensional

XI.1. Problemas del texto

XI.1 Compruebe detalladamente que la ecuación (T11.3) es solución de la ecuación de Schrödinger del oscilador armónico.

La ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico unidimensional es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi\left(x,t\right)}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi\left(x,t\right)=i\hbar\frac{\partial\Psi\left(x,t\right)}{\partial t}, \tag{XI.1}$$

donde ω es la frecuencia de oscilación. Se desea construir una solución de esta ecuación de la forma (T11.3)

$$\Psi\left(x,t\right)=A\exp\left[-\alpha(t)\left(x-\gamma(t)\right)^2+f\left(t\right)-f\left(0\right)\right],\quad \alpha\left(t\right)>0, \tag{XI.2}$$

donde los coeficientes α y γ deben cumplir con las condiciones iniciales

$$\alpha\left(0\right)=a>0,\quad \gamma\left(0\right)=\langle x\rangle\mid_{t=0}\equiv x_0. \tag{XI.3}$$

Con estas condiciones, la función de onda inicial es

$$\Psi_0\left(x\right)\equiv\Psi\left(x,0\right)=A\exp\left[-a\left(x-x_0\right)^2\right]. \tag{XI.4}$$

Derivando (XI.2) se obtiene

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\left[-\dot\alpha(x-\gamma)^2+2\alpha(x-\gamma)\dot\gamma+\dot f(t)\right]\Psi(x,t), \tag{XI.5}$$

$$\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}=\left[-2\alpha+4\alpha^2(x-\gamma)^2\right]\Psi(x,t), \tag{XI.6}$$

expresiones que sustituidas en la ecuación de Schrödinger y simplificando, dan

$$\left(-i\hbar\dot\alpha+2\frac{\hbar^2\alpha^2}{m}-\frac{1}{2}m\omega^2\right)x^2+\left(i2\hbar\dot\alpha\gamma+i2\hbar\alpha\dot\gamma-4\frac{\hbar^2\alpha^2\gamma}{m}\right)x$$
$$+i\hbar\dot f-i\hbar\dot\alpha\gamma^2-i2\hbar\alpha\gamma\dot\gamma-\frac{\hbar^2\alpha}{m}+2\frac{\hbar^2\alpha^2\gamma^2}{m}=0. \tag{XI.7}$$

Dado que las funciones x^0, x y x^2 son linealmente independientes, esta ecuación se puede satisfacer sólo si el coeficiente de cada una de ellas se anula por separado. Estas condiciones determinan $\alpha(t)$, $\gamma(t)$ y $f(t)$, y son

$$-i\hbar\dot{\alpha} + \frac{2\hbar^2}{m}\alpha^2 - \tfrac{1}{2}m\omega^2 = 0, \tag{XI.8}$$

$$i\hbar\dot{\alpha}\gamma + i\hbar\alpha\dot{\gamma} - \frac{2\hbar^2}{m}\alpha^2\gamma = 0, \tag{XI.9}$$

$$-i\hbar\dot{\alpha}\gamma^2 - i2\hbar\alpha\gamma\dot{\gamma} + i\hbar\dot{f} - \frac{\hbar^2}{m}\alpha + \frac{2\hbar^2}{m}\alpha^2\gamma^2 = 0. \tag{XI.10}$$

La solución de la ecuación (XI.8) se obtiene fácilmente con el cambio de variable $\alpha = \lambda\dot{u}/u$, seleccionando λ para cancelar el coeficiente del término cuadrático; se obtiene, integrando:

$$\alpha = -i\frac{m\omega}{2\hbar}\cot(\omega t + \beta). \tag{XI.11}$$

Sin embargo, la ecuación (XI.8) posee también la solución degenerada α=const= $\alpha(0)$. En este caso particular la dispersión de x se mantiene constante, es decir, el paquete oscila alrededor de x_0 sin cambiar su forma, como si fuera rígido. Esta "rigidez" es una manifestación del hecho de que los osciladores que constituyen el paquete están oscilando tan coherentemente como lo permiten las leyes cuánticas, por lo que se le conoce como paquete coherente (o minimal, por razones que se verán en el problema XI.3). Como se señala en el texto, vamos a limitarnos a estudiar este caso, que es particularmente importante, además de ser el más simple posible.

Introduciendo la condición $\dot{\alpha} = 0$ en la ecuación (XI.8) se obtiene

$$\alpha = a = \alpha(0) = \frac{m\omega}{2\hbar}. \tag{XI.12}$$

Sólo si el paquete gaussiano inicial tiene precisamente la anchura $\sigma_x^2(0) = (2a)^{-1} = \hbar/m\omega$ se aplica esta solución. Suponiendo que así es, la ecuación (XI.9) se reduce a una ecuación para la función $\gamma(t)$,

$$\dot{\gamma} + i\omega\gamma = 0, \tag{XI.13}$$

cuya solución con la condición inicial $\gamma(0) = x_0$ es

$$\gamma(t) = x_0 e^{-i\omega t}. \tag{XI.14}$$

Una vez que se sustituyen las expresiones anteriores para α y $\gamma(t)$ en la ecuación (XI.10), queda

$$\dot{f} = -i\frac{m\omega^2}{2\hbar}x_0^2 e^{-2i\omega t} - i\frac{\omega}{2}, \tag{XI.15}$$

cuya solución es

$$f(t) = -i\frac{\omega}{2}t + \frac{m\omega}{4\hbar}x_0^2 e^{-2i\omega t}. \tag{XI.16}$$

Al sustituir los valores encontrados para α, $\gamma(t)$ y $f(t)$ en la expresión para $\Psi(x,t)$ y reorganizar el argumento de la exponencial, se obtiene la función de onda que describe el paquete coherente de osciladores:

$$\Psi(x,t) = A\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x - x_0\cos\omega t)^2 - i\left[\tfrac{1}{2}\omega t + \frac{m\omega}{\hbar}x_0 x\,\mathrm{sen}\,\omega t - \frac{m\omega}{4\hbar}x_0^2\,\mathrm{sen}\,2\omega t\right]\right\}. \tag{XI.17}$$

Ésta es precisamente la ecuación (T11.3).

XI.2 Calcule la constante de normalización de la función (T11.3).

Se trata de calcular la constante de normalización de la función de onda que se construyó en el problema anterior. Esta constante se determina con la condición

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^{*}(x,t)\,\Psi(x,t)\,dx &= |A|^{2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x-x_{0}\cos\omega t\right)^{2}\right]dx\\ &= |A|^{2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}y^{2}\right]dy\\ &= \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}\,|A|^{2}=1,\end{aligned}\tag{XI.18}$$

lo que da, tomando A como real y positiva,

$$A=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}.\tag{XI.19}$$

Podríamos haber obviado el cálculo notando que la amplitud (XI.17) corresponde a la densidad gaussiana

$$\rho(x,t)=|\Psi(x,t)|^{2}=|A|^{2}\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x-x_{0}\cos\omega t\right)^{2}\right].\tag{XI.20}$$

Escribiendo este resultado en la forma usual de una distribución gaussiana normalizada

$$\rho(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{x}}\exp\left[-\frac{\left(x-\bar{x}(t)\right)^{2}}{2\sigma_{x}^{2}}\right],\tag{XI.21}$$

y comparando resultados, se obtiene

$$|A|^{2}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{x}},\quad 2\sigma_{x}^{2}=\frac{\hbar}{m\omega},\tag{XI.22}$$

de donde sigue de inmediato la solución (XI.19).

XI.3 Derive explícitamente las relaciones (T11.16) y (T11.17).

Se trata de calcular la dispersión de $\hat{x}$ y de $\hat{p}$ del paquete coherente descrito por la función de onda $\Psi(x,t)$ de los problemas XI.1 y XI.2. Utilizando los resultados del problema XI.1 obtenemos

$$\langle\hat{x}\rangle=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}x\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x-x_{0}\cos\omega t\right)^{2}\right]\,dx.\tag{XI.23}$$

Con el cambio de variable $y=x-x_{0}\cos\omega t$ se obtiene

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}\rangle &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}(y+x_{0}\cos\omega t)\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}y^{2}\right]\,dy\\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}x_{0}\cos\omega t\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}y^{2}\right]\,dy=x_{0}\cos\omega t.\end{aligned}\tag{XI.24}$$

De manera análoga se tiene que

$$\begin{aligned}\left\langle\hat{x}^{2}\right\rangle &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}(y+x_{0}\cos\omega t)^{2}\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}y^{2}\right]\,dy\\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\left(y^{2}+x_{0}^{2}\cos^{2}\omega t\right)\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}y^{2}\right]\,dy\\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{\pi}m\omega}\int_{-\infty}^{\infty}z^{2}e^{-z^{2}}\,dz+\frac{1}{\sqrt{\pi}}x_{0}^{2}\cos^{2}\omega t\int_{-\infty}^{\infty}e^{-z^{2}}\,dz,\end{aligned}$$

donde se hizo el cambio de variable $z = (m\omega/\hbar)^{1/2} y$. Evaluando las integrales queda

$$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} + x_0^2 \cos^2 \omega t = \frac{\hbar}{2m\omega} + \left\langle \hat{x} \right\rangle^2 . \tag{XI.25}$$

De aquí sigue que la dispersión de $\hat{x}$ para este estado es

$$\left\langle (\Delta\hat{x})^2 \right\rangle = \left\langle \hat{x}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{x} \right\rangle^2 = \frac{1}{4a} = \frac{\hbar}{2m\omega}, \tag{XI.26}$$

que coincide naturalmente con el resultado obtenido antes, ecuación (XI.12).

El cálculo de $\bar{p}$ puede hacerse como sigue. Partimos de

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (x,t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi (x,t)\, dx \\ &= -i\hbar \int \Psi^* (x,t) \left(-\frac{m\omega}{\hbar} (x - x_0 \cos \omega t) \right. \\ &\qquad \left. -i \frac{m\omega}{\hbar} x_0 \operatorname{sen} \omega t \right) \Psi (x,t)\, dx. \end{aligned} \tag{XI.27}$$

Las dos primeras integrales dan $im\omega \langle x - x_0 \cos \omega t \rangle = 0$, por (XI.24); queda entonces

$$\langle \hat{p} \rangle = -i\hbar \left(-i \frac{m\omega}{\hbar} x_0 \operatorname{sen} \omega t \right) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (x,t)\, \Psi (x,t)\, dx = -m\omega x_0 \operatorname{sen} \omega t. \tag{XI.28}$$

Siguiendo un procedimiento similar al usado para calcular $\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle$ se llega a

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = m\hbar\omega - m^2\omega^2 x_0^2 e^{-2i\omega t} - m^2\omega^2 \left\langle \hat{x}^2 \right\rangle + 2m^2\omega^2 x_0 e^{-i\omega t} \left\langle \hat{x} \right\rangle ,$$

es decir,

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = \tfrac{1}{2} m\hbar\omega + m^2\omega^2 x_0^2 \operatorname{sen}^2 \omega t = \tfrac{1}{2} m\hbar\omega + \left\langle \hat{p} \right\rangle^2 . \tag{XI.29}$$

Por lo tanto,

$$\left\langle (\Delta\hat{p})^2 \right\rangle = \left\langle \hat{p}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{p} \right\rangle^2 = \tfrac{1}{2} m\hbar\omega = \hbar^2 a. \tag{XI.30}$$

De las ecuaciones (XI.26) y (XI.30) sigue que el producto de las dispersiones es

$$\left\langle (\Delta\hat{x})^2 \right\rangle \left\langle (\Delta\hat{p})^2 \right\rangle = \tfrac{1}{4} \hbar^2. \tag{XI.31}$$

Este es el mínimo valor que puede tomar este producto, lo que muestra que el paquete coherente de osciladores posee la mínima dispersión compatible con las leyes cuánticas; de ahí que le llamemos minimal. De las relaciones anteriores sigue también que este paquete minimal cumple la condición

$$\left\langle (\Delta\hat{p})^2 \right\rangle = m^2\omega^2 \left\langle (\Delta\hat{x})^2 \right\rangle . \tag{XI.32}$$

La estrecha relación que existe entre estados coherentes y de mínima dispersión del oscilador armónico se estudia directamente en el problema XI.27.

XI.4 Explique la razón por la que la dispersión del paquete inicial dado por la ecuación (T11.3) (es decir, la (XI.17)) es fija. En principio, podríamos partir de un paquete de dispersión inicial arbitraria, función de x ¿Cuál sería la diferencia con el caso estacionario anterior?

La solución construida en el problema XI.1 es muy particular; solamente para la anchura determinada por la ecuación (XI.12) el paquete mantiene su forma durante las oscilaciones. Cuando éste es el caso, tanto la dispersión de x como la de p se mantienen constantes en el tiempo, lo que significa que se ha construido una situación en que la fuerza que actúa sobre las partículas que se dispersan demasiado (por adelantarse o atrasarse más que el resto), es precisamente la necesaria para hacerlas recuperar el movimiento medio perdido. Si la anchura inicial corresponde a otro valor y está dada por la ecuación (XI.11) (y no la (XI.12)), el paquete no oscila más de manera coherente y no se aplica la solución anterior. De hecho, la ecuación de Schrödinger tiene soluciones de la forma (XI.2) con α real sólo para $\alpha = m\omega/2\hbar$; en cualquier otro caso α es un número imaginario, como sigue de la ecuación (XI.11). Para estudiar la evolución de un paquete inicial gaussiano de anchura arbitraria (constante o no), tiene que construirse una función de onda más general que la dada por la ecuación (XI.2). Una discusión más cuantitativa de esta propiedad se da en el problema XI.26.

XI.5 Demuestre paso a paso que las desigualdades de Heisenberg implican que la energía mínima de un oscilador armónico en un estado estacionario es $E_{\text{mín}} = \frac{1}{2}\hbar\omega$.

Como el potencial del oscilador armónico es simétrico, en un estado estacionario debe cumplirse que $\langle\hat{x}\rangle = 0$ y $\langle\hat{p}\rangle = 0$. (Esto se demuestra explícitamente en el problema XI.8.) Debido a esto, podemos escribir

$$\left\langle (\Delta\hat{x})^2 \right\rangle = \left\langle \hat{x}^2 \right\rangle, \tag{XI.33}$$

$$\left\langle (\Delta\hat{p})^2 \right\rangle = \left\langle \hat{p}^2 \right\rangle. \tag{XI.34}$$

Las desigualdades de Heisenberg (ecuación (T8.70))

$$\left\langle (\Delta\hat{x})^2 \right\rangle \left\langle (\Delta\hat{p})^2 \right\rangle \geq \tfrac{1}{4}\hbar^2 \tag{XI.35}$$

toman en este caso la forma

$$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle \left\langle \hat{p}^2 \right\rangle \geq \tfrac{1}{4}\hbar^2. \tag{XI.36}$$

A su vez, la expresión para la energía media del oscilador armónico es

$$E = \frac{\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle}{2m} + \tfrac{1}{2}m\omega^2 \left\langle \hat{x}^2 \right\rangle. \tag{XI.37}$$

De la ecuación (XI.36) sigue que

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle}, \tag{XI.38}$$

lo que sustituido en (XI.37) da

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8m\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle} + \tfrac{1}{2}m\omega^2 \left\langle \hat{x}^2 \right\rangle. \tag{XI.39}$$

El valor mínimo del miembro derecho de esta expresión corresponde al valor de λ que minimiza la función

$$f(\lambda) = \frac{\hbar^2}{8m\lambda} + \tfrac{1}{2}m\omega^2\lambda, \quad \lambda = \left\langle \hat{x}^2 \right\rangle. \tag{XI.40}$$

Este mínimo es la solución de la ecuación

$$f'(\lambda_m) = -\frac{\hbar^2}{8m\lambda_m^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2 = 0 \Rightarrow \lambda_m = \frac{\hbar}{2m\omega}. \tag{XI.41}$$

La solución negativa para λ se debe descartar, pues $\lambda = \langle \hat{x}^2 \rangle > 0$. Como, además,

$$f''(\lambda_m) = \frac{\hbar^2}{4m\lambda_m^3} > 0, \tag{XI.42}$$

la solución (XI.41) corresponde a un mínimo (lo que es inmediato de la forma de $f(\lambda)$). Por lo tanto, la energía mínima para un oscilador armónico unidimensional es

$$E_{\text{mín}} = f(\lambda_m) = \tfrac{1}{2}\hbar\omega. \tag{XI.43}$$

Por tratarse de la mínima energía posible, corresponde al estado base del sistema.

Es interesante comparar con el paquete coherente discutido en el problema XI.1, para el cual también se cumple que $\sigma_x^2\sigma_p^2 = \hbar^2/4$, (cf. ecuación (XI.31)); como la energía del paquete con $\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$ es $\hbar\omega/2$, según sigue de (XI.25) y (XI.29), vemos que el estado base del oscilador armónico coincide con el paquete coherente de mínima energía.

XI.6 Muestre que los estados estacionarios del oscilador armónico cumplen las siguientes relaciones:

$$E_n = m\omega^2 \langle n | x^2 | n \rangle; \quad \left\langle n \left| \hat{T} \right| n \right\rangle = \left\langle n \left| \hat{V} \right| n \right\rangle = \tfrac{1}{2}E_n.$$

Discuta estos resultados desde el punto de vista del teorema del virial.

Calcularemos aquí los valores esperados $\langle n \mid \hat{x}^2 \mid n \rangle$ y $\langle n \mid \hat{p}^2 \mid n \rangle$ de manera directa; en los problemas XI.8 y XI.14 se obtienen estos elementos de matriz en forma más eficiente. Los elementos de matriz de $\hat{x}$ no nulos para el oscilador armónico son (cf. ecuaciones (T11.37) y (T11.38))

$$x_{n,n-1} = x_{n-1,n} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}n}, \quad x_{n,n+1} = x_{n+1,n} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}(n+1)}. \tag{XI.44}$$

Usando las reglas de multiplicación de dos matrices podemos escribir

$$\begin{aligned}
\langle n | \hat{x}^2 | m \rangle &= \sum_k \langle n | \hat{x} | k \rangle \langle k | \hat{x} | m \rangle \\
&= \langle n | \hat{x} | n+1 \rangle \langle n+1 | \hat{x} | m \rangle + \langle n | \hat{x} | n-1 \rangle \langle n-1 | \hat{x} | m \rangle \\
&= \langle n | \hat{x} | n+1 \rangle \langle n+1 | \hat{x} | n \rangle \delta_{nm} \\
&\quad + \langle n | \hat{x} | n+1 \rangle \langle n+1 | \hat{x} | n+2 \rangle \delta_{n+2,m} \\
&\quad + \langle n | \hat{x} | n-1 \rangle \langle n-1 | \hat{x} | n \rangle \delta_{nm} \\
&\quad + \langle n | \hat{x} | n-1 \rangle \langle n-1 | \hat{x} | n-2 \rangle \delta_{n-2,m}.
\end{aligned} \tag{XI.45}$$

Luego los únicos elementos de matriz de $\hat{x}^2$ diferentes de cero que involucran al estado n del oscilador armónico son:

$$\begin{aligned}
x_{nn}^2 = \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle &= \langle n | \hat{x} | n+1 \rangle \langle n+1 | \hat{x} | n \rangle + \langle n | \hat{x} | n-1 \rangle \langle n-1 | \hat{x} | n \rangle, \\
x_{nn}^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1),
\end{aligned} \tag{XI.46}$$

$$x^2_{n,n+2} = \langle n|\,\hat{x}^2\,|n+2\rangle = \langle n|\,\hat{x}\,|n+1\rangle\,\langle n+1|\,\hat{x}\,|n+2\rangle$$
$$= \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{(n+1)\,(n+2)}, \tag{XI.47}$$
$$x^2_{n,n-2} = \langle n|\,\hat{x}^2\,|n-2\rangle = \langle n|\,\hat{x}\,|n-1\rangle\,\langle n-1|\,\hat{x}\,|n-2\rangle$$
$$= \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{(n-1)\,n}. \tag{XI.48}$$

Los elementos de matriz de $\hat{p}^2$ son similares, pero multiplicados por $m^2\omega^2$; en particular,

$$p^2_{nn} = \left\langle n \mid \hat{p}^2 \mid n \right\rangle = m^2\omega^2 \left\langle n \mid \hat{x}^2 \mid n \right\rangle = \tfrac{1}{2}m\hbar\omega\,(2n+1)\,. \tag{XI.49}$$

Con los resultados anteriores podemos calcular los valores esperados de la energía cinética y la energía potencial en el estado n, que resultan

$$\left\langle n \mid \hat{T} \mid n \right\rangle = \frac{1}{2m}\left\langle n \mid \hat{p}^2 \mid n \right\rangle = \tfrac{1}{2}m\omega^2\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle, \tag{XI.50}$$
$$\left\langle n \mid \hat{V} \mid n \right\rangle = \tfrac{1}{2}m\omega^2\left\langle n \mid \hat{x}^2 \mid n \right\rangle = \tfrac{1}{2}m\omega^2\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle = \tfrac{1}{2}\hbar\omega(n+\tfrac{1}{2}). \tag{XI.51}$$

De aquí sigue que

$$E_n = \left\langle n \mid \hat{T}+\hat{V} \mid n \right\rangle = m\omega^2\left\langle x^2 \right\rangle \tag{XI.52}$$

y que

$$\left\langle n \mid \hat{T} \mid n \right\rangle = \left\langle n \mid \hat{V} \mid n \right\rangle = \tfrac{1}{2}E_n. \tag{XI.53}$$

El teorema del virial cuántico establece que para un potencial del tipo $V = ar^s$, los estados estacionarios deben satisfacer la condición dada por la ecuación (3) del problema ilustrativo 9.1 del texto,

$$\left\langle \hat{T} \right\rangle = \frac{s}{2}\left\langle \hat{V} \right\rangle = \frac{s}{s+2}E. \tag{XI.54}$$

Para el oscilador armónico $s = 2$ y esta condición, se reduce a

$$\left\langle \hat{T} \right\rangle = \left\langle \hat{V} \right\rangle = \tfrac{1}{2}E, \tag{XI.55}$$

que coincide con (XI.53). Luego los estados estacionarios del oscilador armónico cumplen con el teorema del virial, como era de esperarse.

XI.7 Demuestre que la variancia de $\hat{x}$ en el estado base del oscilador armónico es

$$\left\langle (\Delta\hat{x})^2 \right\rangle = \left\langle \hat{x}^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}.$$

¿Por qué razón es esta misma la variancia del paquete minimal discutido en el problema XI.1?

La variancia de $\hat{x}$ en el estado base se calcula a partir de los resultados (XI.44) y (XI.46) poniendo $n = 0$; se obtiene

$$\sigma_x^2 = \langle 0|\,\hat{x}^2 - \bar{x}^2\,|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}, \tag{XI.56}$$

que en efecto coincide con la del paquete minimal del problema XI.1, ecuación (XI.26). Como se discute al final del problema XI.5, la razón de esta coincidencia

es que el paquete coherente o minimal de mínima energía (con $x_0 = 0$), es precisamente el estado base del oscilador.

Como ilustración adicional se reobtendrán los resultados anteriores directamente a partir de las soluciones explícitas del problema. La función de onda del estado base del oscilador armónico es (ecuaciones (T11.30) y (T11.34), con $n = 0$):

$$\psi_0(x,t) = \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{-1/4} e^{-x^2/2\alpha_0^2}, \quad \alpha_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}. \tag{XI.57}$$

Las integraciones requeridas son todas directas, y se obtiene

$$\langle\hat{x}\rangle = \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-x^2/\alpha_0^2}\, dx = 0 \tag{XI.58}$$

y

$$\left\langle\hat{x}^2\right\rangle = \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2/\alpha_0^2} dx = \frac{\hbar}{2m\omega}, \tag{XI.59}$$

donde se usó la definición de la función gamma,

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} x^n dx = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)\alpha^{-(n+1)/2} \tag{XI.60}$$

y $\Gamma(\frac{3}{2}) = \frac{1}{2}\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}/2$. Como ya se hizo notar, la función de onda del estado base del oscilador armónico, ecuación (XI.57), tiene la forma de una distribución gaussiana, con

$$\overline{x} = 0 \quad \text{y} \quad \sigma_x^2 = \tfrac{1}{2}\alpha_0^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}. \tag{XI.61}$$

Vemos una vez más que este estado coincide con el paquete minimal discutido en la sección 11.1 del texto, con $x_0 = 0$, es decir, el que corresponde a la energía mínima. No es así extraño que ambas distribuciones correspondan a la misma variancia de $\hat{x}$.

XI.8 Calcule la variancia de $\hat{x}$ y de $\hat{p}$ para un oscilador armónico en el estado n; demuestre que

$$\left\langle(\Delta\hat{x})^2\right\rangle \left\langle(\Delta\hat{p})^2\right\rangle = \tfrac{1}{4}\hbar^2(2n+1)^2.$$

Recalcularemos los valores esperados requeridos empleando el formalismo de los operadores de creación y aniquilación, que resulta un procedimiento mucho más simple que el cálculo directo empleado hasta aquí. Los operadores de creación y aniquilación del oscilador armónico definidos por (T11.42), son

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha_0}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha_0}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right), \tag{XI.62}$$

donde se ha puesto $\alpha_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$. La acción de estos operadores sobre los estados propios del hamiltoniano está descrita por las ecuaciones (T11.43), y es

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle. \tag{XI.63}$$

Invirtiendo el sistema (XI.62) se puede escribir

$$\hat{x} = \frac{\alpha_0}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right), \tag{XI.64}$$

$$\hat{p} = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\alpha_0}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right). \tag{XI.65}$$

De (XI.64), las ecuaciones (XI.44) y la propiedad de ortonormalidad sigue de inmediato que

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle &= \frac{\alpha_0}{\sqrt{2}} \left(\langle n \mid \hat{a} \mid n \rangle + \left\langle n \mid \hat{a}^\dagger \mid n \right\rangle \right) \\
&= \frac{\alpha_0}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{n} \, \langle n \mid n-1 \rangle + \sqrt{n+1} \, \langle n \mid n+1 \rangle \right) = 0, \qquad \text{(XI.66)} \\
\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle &= \frac{\alpha_0}{\sqrt{2}} \left(\langle n \mid \hat{x}\hat{a} \mid n \rangle + \left\langle n \mid \hat{x}\hat{a}^\dagger \mid n \right\rangle \right) \\
&= \frac{\alpha_0}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{n} \, \langle n \mid \hat{x} \mid n-1 \rangle + \sqrt{n+1} \, \langle n \mid \hat{x} \mid n+1 \rangle \right) \\
&= \frac{\alpha_0^2}{2} \sqrt{n} \left(\sqrt{n-1} \, \langle n \mid n-2 \rangle + \sqrt{n} \, \langle n \mid n \rangle \right) \\
&\quad + \frac{\alpha_0^2}{2} \sqrt{n+1} \left(\sqrt{n+1} \, \langle n \mid n \rangle + \sqrt{n+2} \, \langle n \mid n+2 \rangle \right), \qquad \text{(XI.67)} \\
\langle n | \, \hat{x}^2 \, | n \rangle &= \frac{\alpha_0^2}{2} \left(2n+1 \right). \qquad \text{(XI.68)}
\end{aligned}$$

La variancia de $\hat{x}$ en el n-ésimo eigenestado del oscilador armónico resulta

$$\left\langle (\Delta \hat{x})^2 \right\rangle_n = \frac{\alpha_0^2}{2} \left(2n+1 \right). \qquad \text{(XI.69)}$$

De forma completamente análoga se obtiene

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle &= \frac{-i\hbar}{\sqrt{2}\alpha_0} \left(\langle n \mid \hat{a} \mid n \rangle - \left\langle n \mid \hat{a}^\dagger \mid n \right\rangle \right) \\
&= \frac{-i\hbar}{\sqrt{2}\alpha_0} \left(\sqrt{n} \, \langle n \mid n-1 \rangle - \sqrt{n+1} \, \langle n \mid n+1 \rangle \right) = 0, \qquad \text{(XI.70)} \\
\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle &= \frac{-i\hbar}{\sqrt{2}\alpha_0} \left(\langle n \mid \hat{p}\hat{a} \mid n \rangle - \left\langle n \mid \hat{p}\hat{a}^\dagger \mid n \right\rangle \right) \\
&= \frac{-i\hbar}{\sqrt{2}\alpha_0} \left(\sqrt{n} \, \langle n \mid \hat{p} \mid n-1 \rangle - \sqrt{n+1} \, \langle n \mid \hat{p} \mid n+1 \rangle \right) \\
&= \frac{\hbar^2}{2\alpha_0^2} \sqrt{n} \left(-\sqrt{n-1} \, \langle n \mid n-2 \rangle + \sqrt{n} \, \langle n \mid n \rangle \right) \\
&\quad + \frac{\hbar^2}{2\alpha_0^2} \sqrt{n+1} \left(\sqrt{n+1} \, \langle n \mid n \rangle - \sqrt{n+2} \, \langle n \mid n+2 \rangle \right), \qquad \text{(XI.71)}
\end{aligned}$$

es decir,

$$\left\langle (\Delta \hat{p})^2 \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2\alpha_0^2} \left(2n+1 \right). \qquad \text{(XI.72)}$$

De aquí y (XI.69) sigue que

$$\left\langle (\Delta \hat{x})^2 \right\rangle \left\langle (\Delta \hat{p})^2 \right\rangle = \tfrac{1}{4}\hbar^2 \left(2n+1 \right)^2 = \frac{E_n^2}{\omega^2}. \qquad \text{(XI.73)}$$

La mínima dispersión se obtiene para $n = 0$ y corresponde al estado base del oscilador armónico. Conforme aumenta la excitación, ambas dispersiones (en $\hat{x}$ y en $\hat{p}$) aumentan, pero manteniéndose siempre la relación (XI.49). Nótese que para $n > 1$, una reducción de la excitación (o sea, del valor de n) reduce *simultáneamente* ambas dispersiones; esto es perfectamente compatible con las desigualdades de Heisenberg, mientras no se alcance el valor mínimo del producto.

XI.9 Obtenga el paquete minimal estudiado en el problema XI.1 a partir del desarrollo general, ecuación (T5.7), agregando la condición inicial

$$\Psi(x,0) = A\exp\left[-a\left(x-x_0\right)^2\right], \quad a = m\omega/2\hbar$$

(ecuaciones (T11.5) y (T11.7)). Compare con los resultados de la sección 11.6 del texto.

La ecuación (T5.7) dice que la solución general de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo puede ser escrita como una superposición de la forma

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar}\varphi_n(x), \tag{XI.74}$$

donde las $\varphi_n(x)$ son eigenfunciones del hamiltoniano. En el caso del oscilador armónico los eigenvalores de la energía y las correspondientes eigenfunciones son

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right), \tag{XI.75}$$

$$\varphi_n(x) = C_n e^{-\xi^2/2}H_n(\xi), \tag{XI.76}$$

con

$$C_n = \left(\sqrt{\pi}\alpha_0 2^n n!\right)^{-1/2}, \quad \xi = x/\alpha_0, \quad \alpha_0 = \left(\hbar/m\omega\right)^{1/2}, \tag{XI.77}$$

y H_n son polinomios de Hermite. Los coeficientes c_n que aparecen en la expresión (XI.74) están dados por

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_n^*(x)\,\Psi(x,t)\,e^{i\omega_n t}dx, \quad \omega_n = E_n/\hbar. \tag{XI.78}$$

Estos coeficientes son independientes del tiempo, por lo que podemos evaluarlos en cualquier instante; lo más simple es tomar $t=0$, con lo que queda

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_n^*(x)\,\Psi(x,0)\;dx. \tag{XI.79}$$

Sustituyendo la condición inicial propuesta se obtiene

$$c_n = C_n A\alpha_0\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)\,e^{-\xi^2/2}\exp\left[-a\alpha_0^2\left(\xi-\xi_0\right)^2\right]\,d\xi. \tag{XI.80}$$

Si suponemos que el paquete gaussiano inicial se preparó con la dispersión requerida para hacerlo minimal, se cumple que $a\alpha_0^2 = (m\omega/2\hbar)(\hbar/m\omega) = 1/2$, lo que da

$$c_n = C_n A\alpha_0 e^{-\xi_0^2/2}\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)\exp\left[-\xi^2+\xi\xi_0\right]d\xi. \tag{XI.81}$$

Para evaluar la integral observamos que la función generadora de los polinomios de Hermite es

$$\exp\left(2xt-t^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)}{n!}t^n, \tag{XI.82}$$

de donde sigue que [cf. ecuación (TA.18)]

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[2\xi t - t^2 - \xi^2 + \xi\xi_0\right]d\xi = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)\exp\left[-\xi^2+\xi\xi_0\right]d\xi. \tag{XI.83}$$

Pero

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[2\xi t - t^2 - \xi^2 + \xi\xi_0\right] d\xi = \sqrt{\pi}\exp\left(\xi_0^2/4 + \xi_0 t\right), \tag{XI.84}$$

y la ecuación (XI.83) se reduce a

$$\sqrt{\pi}\exp\left(\xi_0^2/4 + \xi_0 t\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \exp\left[-\xi^2 + \xi\xi_0\right] d\xi. \tag{XI.85}$$

Desarrollando el exponencial del lado izquierdo reescribimos esta expresión en la forma

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \xi_0^n \sqrt{\pi} e^{\xi_0^2/4} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \exp\left[-\xi^2 + \xi\xi_0\right] d\xi, \tag{XI.86}$$

e identificando término a término (pues t es arbitraria) se obtiene una expresión para la integral requerida:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \exp\left[-\xi^2 + \xi\xi_0\right] d\xi = \xi_0^n \sqrt{\pi} e^{\xi_0^2/4}. \tag{XI.87}$$

Insertando el resultado anterior en la expresión (XI.80) se obtiene

$$c_n = C_n A \sqrt{\pi} \alpha_0 e^{-\xi_0^2/4} \xi_0^n. \tag{XI.88}$$

El valor de A se determina de la condición de normalización para $\Psi(x,0)$,

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-2a\left(x - x_0\right)^2\right] dx = 1,$$

es decir (tomando A real y positiva),

$$A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}. \tag{XI.89}$$

Con este valor y usando la expresión para C_n (XI.77) llegamos finalmente a

$$c_n = \frac{\xi_0^n e^{-\xi_0^2/4}}{\left(2^n n!\right)^{1/2}}, \tag{XI.90}$$

y, por lo tanto,

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\left(\sqrt{\pi}\alpha_0 2^n n!\right)^{1/2}} \frac{\xi_0^n e^{-\xi_0^2/4}}{\left(2^n n!\right)^{1/2}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)\, e^{-iE_n t/\hbar}. \tag{XI.91}$$

Insertando el valor de la energía E_n podemos escribir

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\left(\sqrt{\pi}\alpha_0\right)^{1/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi_0^2}{4} - \frac{i\omega t}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\xi_0}{2} e^{-i\omega t}\right)^n H_n(\xi). \tag{XI.92}$$

Utilizando de nuevo la expresión de la función generadora de los polinomios de Hermite, podemos reescribir este resultado en la forma

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi_0^2}{4} - \frac{i\omega t}{2} + \xi\xi_0 e^{-i\omega t} - \frac{\xi_0^2}{4} e^{-2i\omega t}\right), \tag{XI.93}$$

o bien, regresando a la variable original x,

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2\alpha_0^2} - \frac{x_0^2}{4\alpha_0^2} - \frac{i\omega t}{2} + \frac{x_0 x}{\alpha_0^2} e^{-i\omega t} - \frac{x_0^2}{4\alpha_0^2} e^{-2i\omega t}\right). \tag{XI.94}$$

Desarrollando $e^{-i\omega t}$ y $e^{-2i\omega t}$ en términos de las funciones armónicas y separando la parte real e imaginaria en el exponente, obtenemos

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x - x_0\cos\omega t)^2\right. \\ &\quad \left. -i\left[\frac{1}{2}\omega t + \frac{m\omega}{\hbar} x x_0 \operatorname{sen}\omega t - \frac{m\omega}{4\hbar} x_0^2 \operatorname{sen} 2\omega t\right]\right\}. \end{aligned} \tag{XI.95}$$

Ésta es precisamente la expresión para el paquete minimal obtenida en el problema XI.1. Nótese el papel central de la condición minimal $a\alpha_0^2 = 1/2$ en esta derivación.

XI.10 Resuelva el problema del oscilador armónico tridimensional en coordenadas cartesianas. Discuta la degeneración para el caso isotrópico.

El potencial de este problema es una función separable en cada una de las coordenadas cartesianas, pues podemos escribir

$$V(x,y,z) = \tfrac{1}{2}m\left(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2\right) = V(x) + V(y) + V(z). \tag{XI.96}$$

Esto permite reducir el estudio del problema al caso de tres osciladores armónicos unidimensionales independientes, de frecuencia ω_1, ω_2 y ω_3, oscilando sobre los ejes Ox, Oy, y Oz, respectivamente, de manera similar a como se hizo en el problema VI.8. La función de onda resulta el producto de las tres eigenfunciones correspondientes,

$$\begin{aligned}\psi_{n_1,n_2,n_3}(x,y,z) &= \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z) \\ &= \prod_{i=1}^{3}\left(\frac{1}{2^{n_i}\, n_i!}\right)^{1/2}\left(\frac{m\omega_i}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi_i^2/2} H_{n_i}(\xi_i), \end{aligned} \tag{XI.97}$$

donde se puso

$$\xi_i = \sqrt{\frac{m\omega_i}{\hbar}}\, x_i, \quad i = 1,2,3, \quad n_i = 0,1,2,3,\ldots \tag{XI.98}$$

La energía del oscilador armónico tridimensional es la suma de las energías de los tres osciladores independientes:

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \sum_{i=1}^{3} E_{n_i} = \hbar\omega_1(n_1 + \tfrac{1}{2}) + \hbar\omega_2(n_2 + \tfrac{1}{2}) + \hbar\omega_3(n_3 + \tfrac{1}{2}). \tag{XI.99}$$

De esta expresión sigue que si la razón entre las frecuencias ω_i es irracional, los niveles de energía son no degenerados. También es cierto que el estado base es siempre no degenerado.

En el caso particular isotrópico $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 \equiv \omega$, y la energía total puede escribirse en la forma

$$E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{3}{2}), \tag{XI.100}$$

con

$$n = n_1 + n_2 + n_3. \tag{XI.101}$$

En este caso todos los niveles de energía, con excepción del estado base, son degenerados. En efecto, si tomamos n_1 fijo, entonces n_2 puede tomar los valores comprendidos entre 0 y $n - n_1$, por lo que la suma $n = n_1 + n_2 + n_3$ para n_1 y n dados puede encontrarse de $n - n_1 + 1$ formas diferentes. La degeneración del estado n resulta así del orden

$$\sum_{n_1=0}^{n} (n - n_1 + 1) = \tfrac{1}{2}(n+1)(n+2). \tag{XI.102}$$

XI.11 Analice la fórmula para la potencia radiada por un oscilador clásico en la aproximación dipolar eléctrica. Compárela con el resultado cuántico y especifique qué diferencia cualitativa existe en la interpretación de estos resultados.

En la aproximación dipolar, la potencia radiada por un sistema clásico con momento dipolar

$$\mathbf{p} = \int \mathbf{x}\rho(\mathbf{x})\, d^3x, \tag{XI.103}$$

donde $\rho(\mathbf{x})$ representa la densidad de carga eléctrica, $\int \rho(\mathbf{x})\, d^3x = e$, es

$$\mathcal{P} = \frac{\omega^4}{3c^3} |\mathbf{p}|^2. \tag{XI.104}$$

Para el oscilador armónico unidimensional podemos escribir, usando coordenadas complejas,

$$p = e x_0 e^{i\omega t} \tag{XI.105}$$

y la potencia radiada se reduce a

$$\mathcal{P} = \frac{\omega^4 e^2}{3c^3} x_0^2. \tag{XI.106}$$

Despreciando la energía radiada por el oscilador, su energía es $E_0 = \frac{1}{2} m x_0^2 \omega^2$ (ésta es la energía inicial del oscilador), lo que nos permite escribir alternativamente

$$\mathcal{P} = \frac{2\omega^2 e^2}{3mc^3} E_0. \tag{XI.107}$$

Por otro lado, la potencia radiada por un oscilador cuántico de la misma frecuencia y en el estado n está dada por la ecuación (T11.39)

$$\mathcal{P} = \frac{2\omega^2 e^2}{3mc^3} (E_n - E_0). \tag{XI.108}$$

Esta expresión dice que un oscilador armónico cuántico excitado radia con probabilidad proporcional a la energía de excitación $E_n - E_0$. Sólo el estado base es estrictamente estacionario. En cambio, el oscilador armónico clásico cargado siempre radia mientras su energía no se anule, como muestra la ecuación (XI.107). En otras palabras, el único estado estrictamente estacionario del oscilador clásico, es el que corresponde al reposo. En el límite $n \to \infty$, la expresión cuántica coincide con la correspondiente expresión clásica.

XI.12 Derive detalladamente las relaciones (T11.40).

Las relaciones a derivar son

$$\hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}, \quad \hat{a}^\dagger\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}, \tag{XI.109}$$

y representan la versión de las ecuaciones (XI.63) en la representación de coordenadas. Los operadores de creación y aniquilación (de ascenso y descenso, respectivamente) del oscilador armónico son, con $\xi = x/\alpha_0$, $\alpha_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$,

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right), \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right). \tag{XI.110}$$

Las eigenfunciones y los eigenvalores del oscilador armónico están dados por las ecuaciones (XI.75) y (XI.76). Derivando la ecuación generadora de los polinomios de Hermite, ecuación (XI.82), se obtiene

$$H_n' = 2nH_{n-1}. \tag{XI.111}$$

Luego podemos escribir

$$\begin{aligned}\frac{d\psi_n}{d\xi} &= C_n\frac{\partial}{\partial\xi}\left[e^{-\xi^2/2}H_n(\xi)\right] = C_n\left[-\xi H_n(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi)\right]e^{-\xi^2/2} \\ &= -\xi\psi_n + 2n\frac{C_n}{C_{n-1}}\psi_{n-1},\end{aligned} \tag{XI.112}$$

o, reordenando,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\psi_n(x) = \sqrt{2}n\frac{C_n}{C_{n-1}}\psi_{n-1}. \tag{XI.113}$$

Para simplificar, observamos que

$$C_n = \left(\sqrt{\pi}\alpha_0 2^n n!\right)^{-1/2} = \left(\sqrt{\pi}\alpha_0 2^{n-1}(n-1)!\right)^{-1/2}(2n)^{-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2n}}C_{n-1}, \tag{XI.114}$$

con lo que podemos escribir

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\psi_n(x) = \sqrt{n}\psi_{n-1}(x). \tag{XI.115}$$

Ahora reescribimos la ecuación (XI.113) en la forma

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\psi_n(x) = \sqrt{2}\xi\psi_n(x) - n\sqrt{2}\frac{C_n}{C_{n-1}}\psi_{n-1}. \tag{XI.116}$$

Utilizando la relación de recurrencia de los polinomios de Hermite (ecuación (T11.36))

$$\xi H_n(\xi) = nH_{n-1}(\xi) + \tfrac{1}{2}H_{n+1}(\xi), \tag{XI.117}$$

se puede reescribir la expresión anterior en la forma

$$\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\psi_n(x) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\frac{C_n}{C_{n+1}}\psi_{n+1}. \tag{XI.118}$$

Finalmente, observamos que haciendo el cambio $n \to n+1$ en (XI.114) sigue que

$$C_n = \sqrt{2(n+1)}C_{n+1}, \tag{XI.119}$$

con lo cual obtenemos

$$\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)\psi_n(x) = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}(x)\,. \tag{XI.120}$$

Las ecuaciones (XI.115) y (XI.120) son los resultados solicitados.

Nótese que los operadores $\hat{a}$ y $\hat{a}^\dagger$ se escriben en términos de los operadores $\hat{x}$ y $\hat{p}$, en la forma:

$$\begin{aligned}
\hat{a} &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right) \\
&= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \alpha_0^2\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(m\omega\hat{x} + i\hat{p}\right), \qquad \text{(XI.121)} \\
\hat{a}^\dagger &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \alpha_0^2\frac{\partial}{\partial x}\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(m\omega\hat{x} - i\hat{p}\right). \qquad \text{(XI.122)}
\end{aligned}$$

Invirtiendo se obtiene

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}), \tag{XI.123}$$

que son las ecuaciones (XI.64) y (XI.65).

XI.13 Demuestre que si $\hat{H}$ es el hamiltoniano del oscilador armónico, se cumplen las ecuaciones (T11.59):

$$\left[\hat{H}, \hat{a}^\dagger\right] = \hbar\omega\hat{a}^\dagger, \quad \left[\hat{H}, \hat{a}\right] = -\hbar\omega\hat{a}.$$

El hamiltoniano del oscilador armónico en términos de los operadores de creación y aniquilación es

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \tfrac{1}{2}\right). \tag{XI.124}$$

El cálculo solicitado se realiza de manera directa con los métodos estudiados en el capítulo VIII, tomando en cuenta que el conmutador de los operadores de creación y aniquilación es

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \tag{XI.125}$$

Tenemos

$$[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega\left[\hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]\hat{a}\right] = \hbar\omega\hat{a}^\dagger. \tag{XI.126}$$

De manera análoga se obtiene el otro conmutador

$$[\hat{H}, \hat{a}] = \hbar\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = \hbar\omega\left[\hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a}\right] = -\hbar\omega\hat{a}. \tag{XI.127}$$

XI.14 Calcule los elementos de matriz x_{nm} y x^2_{nm} del oscilador armónico haciendo uso de la relación $\hat{x} = \sqrt{\hbar/2m\omega}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)$ y las ecuaciones (T11.43).

Estos cálculos han sido ya efectuados en lo esencial en los problemas anteriores. Las ecuaciones (T11.43) equivalen a las ecuaciones (XI.63)

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle\,, \quad \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\,, \tag{XI.128}$$

por lo que, con el uso de la ecuación (XI.123), es posible escribir los elementos de matriz del operador $\hat{x}$ en la forma

$$\begin{aligned} x_{nm} &= \langle n \mid \hat{x} \mid m\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_0\omega}}\,\langle n|\,(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)\,|m\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m_0\omega}}\left(\sqrt{m}\,\langle n \mid m-1\rangle + \sqrt{m+1}\,\langle n \mid m+1\rangle\right). \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m_0\omega}}\left(\sqrt{n+1}\delta_{n,m-1} + \sqrt{n}\delta_{n,m+1}\right). \end{aligned} \tag{XI.129}$$

De manera análoga, con $\alpha_0^2 = \hbar/m_0\omega$,

$$\begin{aligned} \hat{x}^2\,|m\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m_0\omega}}\left(\hat{x}\hat{a}\,|m\rangle + \hat{x}\hat{a}^\dagger\,|m\rangle\right) \\ &= \frac{\alpha_0^2}{2}\Big(\sqrt{m}\hat{a}\,|m-1\rangle + \sqrt{m}\hat{a}^\dagger\,|m-1\rangle \\ &\quad + \sqrt{m+1}\hat{a}\,|m+1\rangle + \sqrt{m+1}\hat{a}^\dagger\,|m+1\rangle\Big) \\ &= \frac{\alpha_0^2}{2}\Big(\sqrt{m\,(m-1)}\,|m-2\rangle + (2m+1)\,|m\rangle \\ &\quad + \sqrt{(m+1)\,(m+2)}\,|m+2\rangle\Big)\,, \end{aligned} \tag{XI.130}$$

de donde sigue que los elementos de matriz de $\hat{x}^2$ son

$$\begin{aligned} x^2_{nm} &= \frac{\hbar}{2m_0\omega}\Big(\sqrt{m\,(m-1)}\delta_{n,m-2} + (2m+1)\,\delta_{n,m} \\ &\quad + \sqrt{(m+1)\,(m+2)}\delta_{n,m+2}\Big)\,. \end{aligned} \tag{XI.131}$$

XI.15 Demuestre que los operadores $\hat{a}$ y $\hat{a}^\dagger$ del oscilador armónico tienen la siguiente representación matricial

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}, \quad \hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}.$$

Los elementos de matriz del operador de aniquilación del oscilador armónico se obtienen directamente de

$$a_{nm} = \langle n \mid \hat{a} \mid m\rangle = \sqrt{m}\,\langle n \mid m-1\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n,m-1}, \tag{XI.132}$$

donde hemos utilizado las ecuaciones (XI.109). En la representación matricial el n-ésimo renglón de la matriz $\hat{a}$ tiene un solo elemento distinto de cero, que es el

colocado en la columna correspondiente a $m = n+1$, y su valor es $\sqrt{n+1} = \sqrt{m}$. Explícitamente, empezando con $n = 0$,

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \tag{XI.133}$$

De manera análoga sigue que

$$a^\dagger_{nm} = \left\langle n \mid \hat{a}^\dagger \mid m \right\rangle = \sqrt{m+1}\,\langle n \mid m+1\rangle = \sqrt{n}\delta_{n,m+1}. \tag{XI.134}$$

La correspondiente matriz tiene en el renglón n un solo elemento distinto de cero, que corresponde a la columna $m = n-1$, y cuyo valor es $\sqrt{n}$. Queda

$$\hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \tag{XI.135}$$

XI.16 Construya las matrices $\hat{x}$ y $\hat{p}$ del oscilador armónico. Muestre que estos resultados están de acuerdo con los obtenidos directamente de las matrices $\hat{a}$ y $\hat{a}^\dagger$ en el problema anterior.

Los elementos de matriz x_{nm} del oscilador armónico están dados por la ecuación (XI.129) y son

$$x_{nm} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_0\omega}}\left(\sqrt{n+1}\delta_{n,m-1} + \sqrt{n}\delta_{n,m+1}\right). \tag{XI.136}$$

Como ejercicio adicional calcularemos con detalle los elementos de matriz del momento lineal:

$$\begin{aligned} p_{nm} &= -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\frac{\partial}{\partial x}\psi_m\,dx \\ &= i\hbar C_m\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\xi e^{-\xi^2/2}H_m(\xi)\,d\xi \\ &\quad -i\hbar C_m\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^* e^{-\xi^2/2}H'_m(\xi)\,d\xi. \end{aligned} \tag{XI.137}$$

Esta expresión se puede reescribir con ayuda de las relaciones de recurrencia de los polinomios de Hermite y de $H'_n = 2nH_{n-1}$ en la forma

$$\begin{aligned} p_{nm} &= i\hbar\left(-\frac{mC_m}{C_{m-1}\alpha_0}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\psi_{m-1}dx + \frac{1}{2\alpha_0}\frac{C_m}{C_{m+1}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\psi_{m+1}dx\right) \\ &= -i\sqrt{\frac{m_0\hbar\omega}{2}}\left(\sqrt{n+1}\delta_{n,m-1} - \sqrt{n}\delta_{n,m+1}\right), \end{aligned} \tag{XI.138}$$

donde hemos utilizado dos veces la relación (XI.114).

Por otra parte, utilizando las ecuaciones (XI.64), (XI.65), (XI.132) y (XI.134) podemos escribir

$$\begin{aligned} x_{nm} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m_0\omega}}\left(\hat{a}_{nm}+\hat{a}^\dagger_{nm}\right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m_0\omega}}\left(\sqrt{n+1}\delta_{n,m-1}+\sqrt{n}\delta_{n,m+1}\right), \qquad \text{(XI.139)} \\ p_{nm} &= \frac{-i\hbar}{\sqrt{2}\alpha_0}\left(\hat{a}_{nm}-\hat{a}^\dagger_{nm}\right) \\ &= -i\sqrt{\frac{m_0\hbar\omega}{2}}\left(\sqrt{n+1}\delta_{n,m-1}-\sqrt{n}\delta_{n,m+1}\right). \qquad \text{(XI.140)} \end{aligned}$$

Estos ejemplos ilustran bien la conveniencia de trabajar con los operadores de creación y aniquilación para simplificar los cálculos asociados con el oscilador armónico.

Escritas explícitamente, la matrices $\hat{x}$ y $\hat{p}$ resultan, con $A=\sqrt{\hbar/2m_0\omega}$, $B=\sqrt{m_0\hbar\omega/2}$,

$$\hat{x}=A\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}, \quad \hat{p}=iB\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \qquad \text{(XI.141)}$$

XI.17 Demuestre que

$$\begin{gathered} e^{\lambda\hat{a}}\hat{a}^\dagger e^{-\lambda\hat{a}}=\hat{a}^\dagger+\lambda, \\ e^{\lambda\hat{a}^\dagger}\hat{a}e^{-\lambda\hat{a}^\dagger}=\hat{a}-\lambda, \\ e^{\lambda\hat{a}}f(\hat{a},\hat{a}^\dagger)e^{-\lambda\hat{a}}=f(\hat{a},\hat{a}^\dagger+\lambda), \quad \text{etc.}, \end{gathered}$$

donde f representa una función que admite un desarrollo en serie de potencias de $\hat{a}$ y $\hat{a}^\dagger$.

Para un par de operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ se puede demostrar, desarrollando los exponenciales y reagrupando términos, que

$$e^{\hat{B}}\hat{A}e^{-\hat{B}}=\hat{A}+\left[\hat{B},\hat{A}\right]+\frac{1}{2!}\left[\hat{B},\left[\hat{B},\hat{A}\right]\right]+\frac{1}{3!}\left[\hat{B},\left[\hat{B},\left[\hat{B},\hat{A}\right]\right]\right]+\cdots \qquad \text{(XI.142)}$$

Tomando $\hat{B}=\lambda\hat{a}$ y $\hat{A}=\hat{a}^\dagger$, esta igualdad da

$$\begin{aligned} e^{\lambda\hat{a}}\hat{a}^\dagger e^{-\lambda\hat{a}} &= \hat{a}^\dagger+\left[\lambda\hat{a},\hat{a}^\dagger\right]+\frac{1}{2!}\left[\lambda\hat{a},\left[\lambda\hat{a},\hat{a}^\dagger\right]\right]+\cdots \\ &= \hat{a}^\dagger+\lambda\left[\hat{a},\hat{a}^\dagger\right]+\frac{\lambda^2}{2!}\left[\hat{a},\left[\hat{a},\hat{a}^\dagger\right]\right]+\cdots=\hat{a}^\dagger+\lambda, \qquad \text{(XI.143)} \end{aligned}$$

es decir,

$$e^{\lambda\hat{a}}\hat{a}^\dagger e^{-\lambda\hat{a}}=\hat{a}^\dagger+\lambda. \qquad \text{(XI.144)}$$

De forma análoga se verifica que

$$e^{\lambda\hat{a}^\dagger}\hat{a}e^{-\lambda\hat{a}^\dagger}=\hat{a}-\lambda. \qquad \text{(XI.145)}$$

Alternativamente, (XI.145) se obtiene de (XI.144) tomando la adjunta de esta última y haciendo el cambio $\lambda \to -\lambda$.

Usando nuevamente el desarrollo (XI.142) escribimos ahora

$$e^{\lambda\hat{a}}\hat{a}^{\dagger m}e^{-\lambda\hat{a}} = \hat{a}^{\dagger m} + \lambda\left[\hat{a},\hat{a}^{\dagger m}\right] + \frac{\lambda^2}{2!}\left[\hat{a},\left[\hat{a},\hat{a}^{\dagger m}\right]\right] + \cdots \tag{XI.146}$$

Con ayuda de la fórmula (derivada en el problema VIII.6)

$$\left[\hat{A},\hat{B}^n\right] = n\hat{B}^{n-1}\left[\hat{A},\hat{B}\right], \tag{XI.147}$$

donde $\hat{A}$ y $\hat{B}$ deben conmutar con $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$, se obtiene que

$$\left[\hat{a},\hat{a}^{\dagger m}\right] = m\hat{a}^{\dagger m-1}\left[\hat{a},\hat{a}^{\dagger}\right] = m\hat{a}^{\dagger m-1}, \tag{XI.148}$$

y

$$\left[\hat{a},\left[\hat{a},\hat{a}^{\dagger m}\right]\right] = m\left(m-1\right)\hat{a}^{\dagger m-2}, \quad \ldots, \tag{XI.149}$$

que sustituido en (XI.146) da

$$e^{\lambda\hat{a}}\hat{a}^{\dagger m}e^{-\lambda\hat{a}} = \hat{a}^{\dagger m} + m\lambda\hat{a}^{\dagger m-1} + \frac{1}{2!}m\left(m-1\right)\lambda^2\hat{a}^{\dagger m-2} + \cdots = \left(\hat{a}^{\dagger}+\lambda\right)^m, \tag{XI.150}$$

resultado que es una generalización de (XI.144) para m arbitraria y exhibe al operador $\hat{a}$ como operador de desplazamiento. Un procedimiento análogo puede aplicarse a la expresión (XI.145) para obtener

$$e^{-\lambda\hat{a}}\hat{a}^m e^{\lambda\hat{a}} = \left(\hat{a}-\lambda\right)^m. \tag{XI.151}$$

Una forma alterna de (XI.150), útil en ocasiones, se obtiene de la siguiente manera. Escribimos

$$\begin{aligned}\hat{a}^{\dagger m} + m\lambda\hat{a}^{\dagger m-1} + \frac{1}{2!}m(m-1)\lambda^2\hat{a}^{\dagger m-2} + \cdots \\ = \left(1 + \lambda\frac{d}{d\hat{a}^{\dagger}} + \frac{\lambda^2}{2!}\frac{d^2}{d\hat{a}^{\dagger 2}} + \cdots\right)\hat{a}^{\dagger m} = e^{\lambda d/d\hat{a}^{\dagger}}\hat{a}^{\dagger m}.\end{aligned} \tag{XI.152}$$

Sustituyendo este resultado en (XI.150), queda

$$e^{\lambda\hat{a}}\hat{a}^{\dagger m}e^{-\lambda\hat{a}} = e^{\lambda\partial/\partial\hat{a}^{\dagger}}\hat{a}^{\dagger m}. \tag{XI.153}$$

Sea ahora $f\left(\hat{a},\hat{a}^{\dagger}\right)$ una función de los operadores de creación y aniquilación que puede expresarse en la forma

$$f\left(\hat{a},\hat{a}^{\dagger}\right) = \sum_{n,m} c_{nm}\hat{a}^n\hat{a}^{\dagger m}. \tag{XI.154}$$

Se sigue, con ayuda de (XI.150), que

$$\begin{aligned}e^{\lambda\hat{a}}f\left(\hat{a},\hat{a}^{\dagger}\right)e^{-\lambda\hat{a}} &= \sum_{n,m} c_{nm}e^{\lambda\hat{a}}\hat{a}^n\hat{a}^{\dagger m}e^{-\lambda\hat{a}} = \sum_{n,m} c_{nm}\hat{a}^n e^{\lambda\hat{a}}\hat{a}^{\dagger m}e^{-\lambda\hat{a}} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm}\hat{a}^n\left(\hat{a}^{\dagger}+\lambda\right)^m,\end{aligned} \tag{XI.155}$$

es decir,

$$e^{\lambda\hat{a}}f\left(\hat{a},\hat{a}^{\dagger}\right)e^{-\lambda\hat{a}} = f\left(\hat{a},\hat{a}^{\dagger}+\lambda\right). \tag{XI.156}$$

XI.18 Determine los valores propios del hamiltoniano

$$\hat{H} = h_0 \hat{a}^\dagger \hat{a} + h_1(\hat{a} + \hat{a}^\dagger).$$

Sugerencia: introduzca una nueva pareja de operadores de creación y aniquilación que diagonalice $\hat{H}$.

Sea una nueva pareja de operadores mutuamente adjuntos

$$\hat{A} = \hat{a} - \beta, \quad \hat{A}^\dagger = \hat{a}^\dagger - \beta^*, \tag{XI.157}$$

donde β es un parámetro a determinar. La idea es buscar un valor de β que diagonalice el hamiltoniano dado; una vez logrado esto, el problema se resuelve con los procedimientos usuales. Sustituyendo en el hamiltoniano propuesto se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{H} &= h_0 \left(\hat{A}^\dagger + \beta^*\right)\left(\hat{A} + \beta\right) + h_1(\hat{A}^\dagger + \beta^* + \hat{A} + \beta) \\ &= h_0 \hat{A}^\dagger \hat{A} + (h_0\beta + h_1)\,\hat{A}^\dagger + (h_0\beta^* + h_1)\,\hat{A} \\ &\quad + h_0\beta^*\beta + h_1\,(\beta^* + \beta)\,. \end{aligned} \tag{XI.158}$$

Para diagonalizar esta expresión basta demandar que los coeficientes de los operadores $\hat{A}^\dagger$ y $\hat{A}$ se anulen; esto se logra tomando

$$\beta^* = \beta = -h_1/h_0. \tag{XI.159}$$

Con esta selección el hamiltoniano se reduce a la forma estándar

$$H = h_0 \hat{A}^\dagger \hat{A} - \frac{h_1^2}{h_0}, \tag{XI.160}$$

y los nuevos operadores de creación y aniquilación son

$$\hat{A} = \hat{a} + h_1/h_0, \quad \hat{A}^\dagger = \hat{a}^\dagger + h_1/h_0. \tag{XI.161}$$

Está claro que las reglas de conmutación no han cambiado,

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]. \tag{XI.162}$$

La ecuación de Schrödinger a resolver es ahora

$$E\psi = \left(h_0 \hat{A}^\dagger \hat{A} - \frac{h_1^2}{h_0}\right)\psi. \tag{XI.163}$$

Ponemos

$$E = E' - \tfrac{1}{2}h_0 - \frac{h_1^2}{h_0}, \tag{XI.164}$$

con lo que se obtiene

$$E'\psi = \left(h_0 \hat{A}^\dagger \hat{A} + \tfrac{1}{2}h_0\right)\psi. \tag{XI.165}$$

Definiendo una frecuencia ω con la relación $h_0 = \hbar\omega$, esta ecuación representa un oscilador armónico, con valores propios para la energía

$$E' = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right) = h_0\left(n + \tfrac{1}{2}\right). \tag{XI.166}$$

Luego las energías propias de hamiltoniano original son

$$E_n = h_0 n - \frac{h_1^2}{h_0}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{XI.167}$$

El presente método de diagonalización ha mostrado ser sumamente útil en diversas aplicaciones, ya sea de manera exacta en situaciones lineales, como es el caso aquí, o como método aproximado en problemas no lineales y más complejos.

XI.19 Obtenga explícitamente la solución normalizada (T11.69) de la ecuación diferencial (T11.67) que determina los estados propios del operador de aniquilación.

Los estados propios del operador de aniquilación del oscilador armónico, definidos como soluciones de la ecuación $\hat{a}\,|\psi_\alpha\rangle = \alpha\,|\psi_\alpha\rangle$, son los estados coherentes de este sistema. La ecuación (T11.67) describe a estos estados en la representación x, y es

$$\left(\omega x + \frac{\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_\alpha = \omega x_0 e^{-i\omega t}\psi_\alpha. \tag{XI.168}$$

Esta ecuación es de la forma

$$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial x} + a\,(x - f(t))\,\psi_\alpha = 0, \tag{XI.169}$$

con $a = m\omega/\hbar$, $f(t) = x_0 e^{-i\omega t}$. La sustitución $\psi_\alpha = A(t)e^{\theta(x,t)}$ conduce a la nueva ecuación diferencial

$$a\,(x - f(t)) + \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0, \tag{XI.170}$$

cuya solución, $\theta(x,t) = -\frac{a}{2}(x - f(t))^2$, es inmediata. De esta manera se obtiene

$$\begin{aligned}
\psi_\alpha &= A\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x - x_0 e^{-i\omega t}\right)^2\right) \\
&= A\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}\left[(x - x_0\cos\omega t + 2ix_0\,\mathrm{sen}\,\omega t)\right.\right. \\
&\qquad \left.\left. \times\,(x - x_0\cos\omega t) - x_0^2\,\mathrm{sen}^{\,2}\omega t\right]\right\}.
\end{aligned} \tag{XI.171}$$

La función $A(t)$ se determina de la condición de normalización,

$$|A|^2 \exp\left(\frac{m\omega}{\hbar}x_0^2\,\mathrm{sen}^2\,\omega t\right)\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\,(x - x_0\cos\omega t)^2\right)dx = 1,$$

y resulta, con una selección apropiada de la fase,

$$A(t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x_0^2\,\mathrm{sen}^2\,\omega t\right). \tag{XI.172}$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned}
\psi_\alpha &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\,(x - x_0\cos\omega t + 2ix_0\,\mathrm{sen}\,\omega t)\,(x - x_0\cos\omega t)\right] \\
&= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\,(x - x_0\cos\omega t)^2\right. \\
&\quad \left. -i\,\frac{m\omega}{\hbar}x_0\,(x - x_0\cos\omega t)\,\mathrm{sen}\,\omega t\right],
\end{aligned} \tag{XI.173}$$

que es equivalente a la expresión (T11.69).

XI.20 Considere un oscilador armónico de frecuencia ω en su estado base. Para el tiempo $t = 0$, la frecuencia de oscilación es reducida bruscamente al valor $\omega' = \omega/k$, con $1 < k < \infty$. Calcule $\psi(x,t)$ para $t > 0$. Determine:

a) la probabilidad de que el sistema se encuentre en el eigenestado con energía E_n para el tiempo t;

b) el valor de n para el cual esta probabilidad alcanza su máximo.

Discuta los resultados.

Hasta $t = 0$ el sistema se encuentra en su estado base con función de onda

$$\psi(x,0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right). \tag{XI.174}$$

A partir de $t > 0$ la frecuencia es ω', por lo que el nuevo propagador es[1]

$$K\left(x,t,x',0\right) = \sqrt{\frac{-im\omega'}{2\pi\hbar \operatorname{sen}\omega' t}} \exp\left[\frac{im\omega'}{\hbar}\frac{\left(x^2+x'^2\right)\cos\omega' t - 2xx'}{2\operatorname{sen}\omega' t}\right]. \tag{XI.175}$$

La función de onda para $t > 0$ determinada por este propagador es

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \int_{-\infty}^{\infty} K\left(x,t,x',0\right)\psi\left(x',0\right)dx' \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{-im\omega'}{2\pi\hbar\operatorname{sen}\omega' t}} \\ &\quad\times\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[\frac{im\omega'}{\hbar}\frac{\left(x^2+x'^2\right)\cos\omega' t - 2xx'}{2\operatorname{sen}\omega' t} - \frac{m\omega}{2\hbar}x'^2\right]dx'.\end{aligned} \tag{XI.176}$$

Esta expresión puede reescribirse en la forma

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{-im\omega'}{2\pi\hbar\operatorname{sen}\omega' t}}\exp\left(\frac{im\omega'}{2\hbar}x^2\cot\omega' t\right) \\ &\quad\times\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{m}{2\hbar}\left(\omega - i\omega'\cot\omega' t\right)x'^2 - i\frac{m\omega'}{\hbar}xx'\csc\omega' t\right]dx'.\end{aligned} \tag{XI.177}$$

Con ayuda de la fórmula

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\alpha x^2 - \beta x\right)dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right), \tag{XI.178}$$

escribimos (XI.177) en la forma

$$\psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\sqrt{\frac{-i}{2\pi\hbar\operatorname{sen}\omega' t}}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{k - i\cot\omega' t}}\exp\left(\frac{im\omega' x^2\cos\omega' t}{2\hbar\operatorname{sen}\omega' t}\right)$$

[1] El propagador del oscilador armónico se construye explícitamente en el problema XI.21 y en el problema XI.25; aquí estamos usando el resultado dado por la ecuación (XI.205).

$$\times \exp\left(-\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{im\omega' x}{\hbar \operatorname{sen}\omega' t}\right)^2 \frac{1}{i\omega' \cot\omega' t - \omega}\right)$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{\cos\omega' t + ik\operatorname{sen}\omega' t}}$$

$$\times \exp\left(-\frac{m\omega' x^2}{2\hbar}\cdot\frac{k\cos\omega' t + i\operatorname{sen}\omega' t}{\cos\omega' t + ik\operatorname{sen}\omega' t}\right)$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{\cos\frac{\omega}{k}t + ik\operatorname{sen}\frac{\omega}{k}t}}$$

$$\times \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\cdot\frac{\cos\frac{\omega}{k}t + \frac{i}{k}\operatorname{sen}\frac{\omega}{k}t}{\cos\frac{\omega}{k}t + ik\operatorname{sen}\frac{\omega}{k}t}x^2\right). \tag{XI.179}$$

Esta función se reduce apropiadamente a $\psi(x,0)$ cuando se toma $t=0$, y para $k=1$ se reduce a la función de onda $\psi_0(x,t)$ del estado base.

La probabilidad de que en el tiempo t el sistema se encuentre en el eigenestado ψ_n es

$$P_n = |\langle\psi(x,t) \mid \psi_n\rangle|^2, \tag{XI.180}$$

con

$$\langle\psi(x,t) \mid \psi_n\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{\alpha_0' C_n}{\sqrt{\cos\omega' t - ik\operatorname{sen}\omega' t}} \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\tfrac{1}{2}\left(\frac{k\cos\omega' t - i\operatorname{sen}\omega' t}{\cos\omega' t - ik\operatorname{sen}\omega' t} + 1\right)\xi^2\right] H_n(\xi)\, d\xi, \tag{XI.181}$$

$x = \alpha_0'\xi$ y $\alpha_0' = (\hbar/m\omega')^{1/2}$. Poniendo

$$\tfrac{1}{2}\left(\frac{k\cos\omega' t - i\operatorname{sen}\omega' t}{\cos\omega' t - ik\operatorname{sen}\omega' t} + 1\right)\xi^2 = \gamma\xi^2 \equiv \xi'^2 \tag{XI.182}$$

podemos reescribir la amplitud de transición en la forma

$$\langle\psi(x,t) \mid \psi_n\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{\alpha_0' C_n}{\sqrt{\cos\omega' t - ik\operatorname{sen}\omega' t}} \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} H_n\left(\frac{1}{\sqrt{\gamma}}\xi'\right) d\xi'. \tag{XI.183}$$

Como la paridad de los polinomios de Hermite H_n es la de su índice n, la amplitud $\langle\psi(x,t) \mid \psi_n\rangle$ resulta distinta de cero sólo si n es un número par; esto significa que los estados con n impar no contribuyen a la función de onda para $t > 0$. Esto se debe a que el estado inicial es par. Haciendo la sustitución $n \to 2n$ con n un número entero, se obtiene que las amplitudes no nulas son

$$\langle\psi(x,t) \mid \psi_{2n}\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{\alpha_0' C_{2n}}{\sqrt{\cos\omega' t - ik\operatorname{sen}\omega' t}} \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi'^2} H_{2n}\left(\frac{1}{\sqrt{\gamma}}\xi'\right) d\xi'. \tag{XI.184}$$

Con la fórmula[2]

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_{2m}(xy)\, dx = \sqrt{\pi}\frac{(2m)!}{m!}\left(y^2 - 1\right)^m \tag{XI.185}$$

[2]Gradshteyn y Ryzhik (1980), 7.373, 2.

y las definiciones de α_0' y C_{2n}, se llega a

$$\langle \psi\,(x,t) \mid \psi_{2n}\rangle = \sqrt{\frac{(2n)!}{2^{2n}}}\frac{(\omega'\omega)^{1/4}}{n!}\frac{1}{\sqrt{\omega'\cos\omega' t - i\omega\,\mathrm{sen}\,\omega' t}}\frac{1}{\sqrt{\gamma}}\left(\frac{1-\gamma}{\gamma}\right)^n. \tag{XI.186}$$

De aquí y (XI.180) se obtiene para la probabilidad de que el sistema esté en el eigenestado con energía E_{2n} al tiempo t

$$P_{2n} = \frac{(2n)!}{2^{2n}\,(n!)^2}\frac{\sqrt{k}}{\sqrt{\cos^2\omega' t + k^2\,\mathrm{sen}\,^2\omega' t}}\left|\frac{1}{\sqrt{\gamma}}\left(\frac{1-\gamma}{\gamma}\right)^n\right|^2. \tag{XI.187}$$

Como

$$\gamma = \frac{k+1}{2}\frac{\cos\omega' t - i\,\mathrm{sen}\,\omega' t}{\cos\omega' t - ik\,\mathrm{sen}\,\omega' t} \tag{XI.188}$$

y

$$\frac{1-\gamma}{\gamma} = \frac{\omega-\omega'}{\omega+\omega'} = \frac{k-1}{k+1}, \tag{XI.189}$$

se tiene que

$$\left|\frac{1}{\sqrt{\gamma}}\left(\frac{1-\gamma}{\gamma}\right)^n\right|^2 = \frac{2}{k+1}\left(\frac{k-1}{k+1}\right)^{2n}\sqrt{\cos^2\omega' t + k^2\mathrm{sen}^2\omega' t}, \tag{XI.190}$$

con lo cual

$$P_{2n} = \frac{(2n)!}{2^{2n}\,(n!)^2}\frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega+\omega'}\left(\frac{\omega'-\omega}{\omega'+\omega}\right)^{2n}. \tag{XI.191}$$

La probabilidad de que el sistema esté en el eigenestado con energía E_{2n+1} es nula,

$$P_{2n+1} = 0. \tag{XI.192}$$

Conforme n crece, el valor de P_{2n} decrece; el valor para el cual se obtiene la máxima probabilidad de realización es el estado base, $n = 0$. La probabilidad máxima P_0 está dada por el cociente de la media geométrica y la media aritmética de las dos frecuencias involucradas:

$$P_0 = \frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega+\omega'} = \frac{2\sqrt{k}}{1+k}. \tag{XI.193}$$

XI.21 Construya el propagador de Feynman para el oscilador armónico.

El propagador solicitado se puede construir usando el método de integrales de trayectoria (como se hace, por ejemplo, en Galindo y Pascual (1989), problema 3.28). Pero es posible simplificar considerablemente el cálculo empleando la representación del operador de creación que se estudia en el problema adicional XI.24, que es el procedimiento que seguiremos aquí. En esta representación las funciones propias del oscilador armónico están dadas por la ecuación (XI.246):

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{i\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{n!}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-i\infty}^{i\infty}\hat{a}^{\dagger n}\exp\left(\frac{\xi^2}{2} - \sqrt{2}\xi\hat{a}^\dagger + \frac{\hat{a}^{\dagger 2}}{2}\right)d\hat{a}^\dagger, \tag{XI.194}$$

donde por $\hat{a}^\dagger$ debe entenderse en este contexto como un número complejo, sobre el cual se realiza la integración a lo largo del eje imaginario del plano complejo

de $\hat{a}^\dagger$. Como es usual para el oscilador armónico, se ha escrito $\xi = (m\omega/\hbar)^{1/2}\, x$. El propagador se obtiene directamente con ayuda de la ecuación (T5.22),

$$K\left(x,t \mid x',t'\right) = \sum_n \psi_n^*\left(x'\right)\psi_n\left(x\right)\exp\left[-i\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\omega\left(t-t'\right)\right], \qquad \text{(XI.195)}$$

lo que da[3]

$$\begin{aligned} K\left(\xi,t \mid \xi',t'\right) &= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\sum_n\left[\frac{1}{n!}\int_{i\infty}^{-i\infty}\hat{a}'^{\dagger n}\exp\left(\frac{\xi'^2}{2}-\sqrt{2}\xi'\hat{a}'^\dagger+\frac{\hat{a}'^{\dagger 2}}{2}\right)d\hat{a}'^\dagger\right] \\ &\quad\times\int_{-i\infty}^{i\infty}\hat{a}^{\dagger n}\exp\left(\frac{\xi^2}{2}-\sqrt{2}\xi\hat{a}^\dagger+\frac{\hat{a}^{\dagger 2}}{2}\right)d\hat{a}^\dagger \\ &\quad\times\exp\left[-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega\left(t-t'\right)\right] \\ &= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\exp\left[\frac{\xi'^2}{2}+\frac{\xi^2}{2}-i\frac{\omega}{2}\left(t-t'\right)\right] \\ &\quad\times\sum_n\int_{-i\infty}^{i\infty}d\hat{a}^\dagger\int_{i\infty}^{-i\infty}d\hat{a}'^\dagger\frac{\hat{a}'^{\dagger n}\hat{a}^{\dagger n}}{n!} \\ &\quad\times\exp\left[-in\omega\left(t-t'\right)-\sqrt{2}\left(\xi\hat{a}^\dagger+\xi'\hat{a}'^\dagger\right)+\tfrac{1}{2}\left(\hat{a}^{\dagger 2}+\hat{a}'^{\dagger 2}\right)\right]. \end{aligned} \qquad \text{(XI.196)}$$

Reagrupando y observando que

$$\sum_n\frac{\hat{a}'^{\dagger n}\hat{a}^{\dagger n}}{n!}e^{-in\omega(t-t')} = \sum_n\frac{\left(\hat{a}'^\dagger\hat{a}^\dagger e^{-i\omega(t-t')}\right)^n}{n!} = \exp\left(\hat{a}'^\dagger\hat{a}^\dagger e^{-i\omega\tau}\right), \qquad \text{(XI.197)}$$

donde se ha introducido por comodidad la abreviación $\tau = t-t'$, podemos escribir

$$\begin{aligned} K\left(\xi,\xi';\tau\right) &= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\exp\left(\frac{\xi'^2}{2}+\frac{\xi^2}{2}-i\frac{\omega\tau}{2}\right)\int_{-i\infty}^{i\infty}d\hat{a}^\dagger\int_{i\infty}^{-i\infty}d\hat{a}'^\dagger \\ &\quad\times\exp\left[-\sqrt{2}\left(\xi\hat{a}^\dagger+\xi'\hat{a}'^\dagger\right)+\frac{1}{2}\left(\hat{a}^{\dagger 2}+\hat{a}'^{\dagger 2}\right)+\hat{a}'^\dagger\hat{a}^\dagger e^{-i\omega\tau}\right]. \end{aligned} \qquad \text{(XI.198)}$$

Las integrales requeridas se transforman en las integrales gaussianas

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ax^2-bx}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{b^2/4a} \qquad \text{(XI.199)}$$

con el cambio de variables

$$\hat{a}^\dagger = i\alpha, \quad \hat{a}'^\dagger = -i\beta. \qquad \text{(XI.200)}$$

Con este procedimiento se llega a

$$\begin{aligned} K\left(\xi,\xi';\tau\right) &= \sqrt{\frac{-im\omega}{2\pi\hbar\,\mathrm{sen}\,\omega\tau}} \\ &\quad\times\exp\left[\frac{\frac{1}{2}\left(\xi^2+\xi'^2\right)\left(e^{-2i\omega\tau}+1\right)-2\xi\xi'e^{-i\omega\tau}}{e^{-2i\omega\tau}-1}\right]. \end{aligned} \qquad \text{(XI.201)}$$

[3]Se sigue la discusión presentada en Saxon (1968), sección 6.6. En el problema adicional XI.25 se estudia otro método para obtener la función de Green de un problema lineal.

Una forma más frecuente de este resultado se obtiene transformando como sigue. Con

$$1 - e^{-2i\omega\tau} = e^{-i\omega\tau}\left(e^{i\omega\tau} - e^{-i\omega\tau}\right) = 2i\,\mathrm{sen}\,\omega\tau e^{-i\omega\tau}, \tag{XI.202}$$

$$1 + e^{-2i\omega\tau} = e^{-i\omega\tau}\left(e^{i\omega\tau} + e^{-i\omega\tau}\right) = 2\cos\omega\tau e^{-i\omega\tau}, \tag{XI.203}$$

reescribimos el propagador en la forma

$$K\left(\xi,\xi';\tau\right) = \sqrt{\frac{-im\omega}{2\pi\hbar\,\mathrm{sen}\,\omega\tau}}\exp\left[i\frac{\left(\xi^2+\xi'^2\right)\cos\omega\tau - 2\xi\xi'}{2\,\mathrm{sen}\,\omega\tau}\right], \tag{XI.204}$$

es decir, retornando a la variable x,

$$K\left(x,t\mid x',t'\right) = \sqrt{\frac{-im\omega}{2\pi\hbar\,\mathrm{sen}\,\omega\left(t-t'\right)}}\exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar}\frac{\left(x^2+x'^2\right)\cos\omega\left(t-t'\right) - 2xx'}{\mathrm{sen}\,\omega\left(t-t'\right)}\right]. \tag{XI.205}$$

Éste es el propagador de Feynman para el oscilador armónico.

XI.22 Calcule las frecuencias normales Ω_1 y Ω_2 del hamiltoniano dado por la ecuación (T11.79).

El sistema consiste de dos osciladores unidimensionales de igual masa pero diferente frecuencia, acoplados linealmente; el hamiltoniano es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) + \tfrac{1}{2}m\omega_1^2x_1^2 + \tfrac{1}{2}m\omega_2^2x_2^2 - m\omega_{12}^2x_1x_2. \tag{XI.206}$$

Para obtener las coordenadas normales del problema, es decir, aquellas en las cuales los osciladores se desacoplan, introducimos las nuevas variables x y X obtenidas a partir de x_1, x_2 mediante una transformación lineal con elementos a_{ij},

$$X = a_{11}x_1 + a_{12}x_2, \quad x = a_{21}x_1 + a_{22}x_2. \tag{XI.207}$$

Como se discute en la sección 11.7 del texto, el problema se resuelve con una transformación ortogonal. Con el determinante de la transformación igual a 1,

$$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = 1, \tag{XI.208}$$

la inversa de (XI.207) es

$$x_1 = a_{22}X - a_{12}x, \quad x_2 = -a_{21}X + a_{11}x. \tag{XI.209}$$

Como deseamos que la transformación sea ortogonal, debemos poner $\hat{a}^T = \hat{a}^{-1}$. Comparando (XI.207) y (XI.209) vemos que esta condición implica

$$a_{11} = a_{22}; \quad a_{12} = -a_{21}. \tag{XI.210}$$

Las condiciones (XI.208) y (XI.210) dejan libre un solo parámetro, que habremos de escoger para diagonalizar la matriz de frecuencias, así que ponemos

$$a_1 \equiv a_{11} = a_{22}, \quad a_0 \equiv a_{12} = -a_{21}, \quad a_0^2 + a_1^2 = 1. \tag{XI.211}$$

Es simple verificar que la transformación preserva la diagonalidad de la energía cinética; en efecto, tenemos

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} &= \left(a_1\frac{\partial}{\partial X}-a_0\frac{\partial}{\partial x}\right)^2+\left(a_0\frac{\partial}{\partial X}+a_1\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\\ &= \left(a_0^2+a_1^2\right)\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\left(a_0^2+a_1^2\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}+2\left(-a_0a_1+a_0a_1\right)\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial X}\\ &= \frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}. \qquad \text{(XI.212)}\end{aligned}$$

La energía potencial se escribe ahora en la forma

$$\begin{aligned}V &= \frac{m}{2}\omega_1^2\left(a_1X-a_0x\right)^2+\frac{m}{2}\omega_2^2\left(a_0X+a_1x\right)^2-m\omega_{12}^2\left(a_1X-a_0x\right)\left(a_0X+a_1x\right)\\ &= \frac{m}{2}\left[\left(\omega_1^2a_0^2+\omega_2^2a_1^2+2\omega_{12}^2a_0a_1\right)x^2+\left(\omega_1^2a_1^2+\omega_2^2a_0^2-2\omega_{12}^2a_0a_1\right)X^2\right]\\ &\quad +m\left[\left(\omega_2^2-\omega_1^2\right)a_0a_1+\omega_{12}^2\left(a_0^2-a_1^2\right)\right]Xx. \qquad \text{(XI.213)}\end{aligned}$$

Para desacoplar los osciladores basta escoger el parámetro libre para que se anule el coeficiente del término cruzado, es decir, tal que se cumpla la condición

$$\left(\omega_2^2-\omega_1^2\right)a_0a_1+\omega_{12}^2\left(a_0^2-a_1^2\right)=0. \qquad \text{(XI.214)}$$

Esta condición determina un valor para el cociente $\beta\equiv a_1/a_0$, función de las frecuencias del sistema; conocido este valor, se puede escribir la solución

$$a_0=\frac{1}{\sqrt{1+\beta^2}},\quad a_1=\frac{\beta}{\sqrt{1+\beta^2}}. \qquad \text{(XI.215)}$$

Las frecuencias de los modos normales siguen de la ecuación (XI.213) y están dadas por

$$\begin{aligned}\Omega_1^2\equiv\omega_x^2 &= \omega_1^2a_0^2+\omega_2^2a_1^2+2\omega_{12}^2a_0a_1\\ &= a_0^2\left(\omega_1^2+\omega_2^2\beta^2+2\omega_{12}^2\beta\right), \qquad \text{(XI.216)}\\ \Omega_2^2\equiv\omega_X^2 &= \omega_1^2a_1^2+\omega_2^2a_0^2-2\omega_{12}^2a_0a_1\\ &= a_0^2\left(\omega_1^2\beta^2+\omega_2^2-2\omega_{12}^2\beta\right). \qquad \text{(XI.217)}\end{aligned}$$

El nuevo hamiltoniano es

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)+\frac{m}{2}\omega_X^2X^2+\frac{m}{2}\omega_x^2x^2, \qquad \text{(XI.218)}$$

y los valores propios de la energía resultan

$$E_{Nn}=\hbar\omega_X\left(N+\tfrac{1}{2}\right)+\hbar\omega_x\left(n+\tfrac{1}{2}\right). \qquad \text{(XI.219)}$$

La función de onda correspondiente es

$$\Psi_{Nn}=\Phi_N(X)\psi_n(x), \qquad \text{(XI.220)}$$

donde cada factor es una función de onda de oscilador armónico.

Para el caso particular en que los dos osciladores tienen la misma frecuencia, $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$, de (XI.214) se obtiene que $a_0^2 = a_1^2$, por lo que podemos tomar $\beta = 1$, y (XI.207) da

$$X = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,(x_2 + x_1)\,, \quad x = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,(x_2 - x_1)\,. \tag{XI.221}$$

En este caso los modos normales describen las oscilaciones del centro de masa y del movimiento relativo.

XI.23 Utilice métodos similares a los usados en el problema ilustrativo 9.6 del texto para mostrar que un oscilador armónico satisface las siguientes relaciones de conmutación y desigualdades de Heisenberg (todos los resultados son exactos para δt arbitrario):

$$[\hat{q}(t), \hat{p}(t+\delta t)] = i\hbar \cos\omega\delta t, \quad \text{etc.};$$
$$\Delta\hat{q}(t)\Delta\hat{p}(t+\delta t) \geq \frac{\hbar}{2}\,|\cos\omega\delta t|\,,$$
$$\Delta\hat{q}(t)\Delta\hat{q}(t+\delta t) \geq \frac{\hbar}{2m\omega}\,|\text{sen}\ \omega\delta t|\,,$$
$$\Delta\hat{p}(t)\Delta\hat{p}(t+\delta t) \geq \frac{1}{2}\hbar m\omega\,|\text{sen}\ \omega\delta t|\,.$$

En el problema ilustrativo 9.6 del texto (cf. el problema IX.13) se resolvió un problema similar, pero usando un desarrollo en serie de potencias de δt debido a la generalidad del problema. En el presente caso, por tratarse del oscilador armónico, es posible obtener la solución exacta en forma cerrada. Partimos de las ecuaciones de Heisenberg del oscilador

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m}, \quad \frac{d\hat{p}}{dt} = -m\omega^2\hat{x}, \tag{XI.222}$$

cuyas soluciones para el tiempo t pueden ser escritas en la forma (cf. ecuaciones (T11.65)),

$$\hat{x}(t) = \hat{x}_0 \cos\omega t + \frac{\hat{p}_0}{m\omega}\,\text{sen}\,\omega t, \tag{XI.223}$$
$$\hat{p}(t) = \hat{p}_0 \cos\omega t - m\omega\hat{x}_0\,\text{sen}\,\omega t, \tag{XI.224}$$

en donde $\hat{x}_0$ y $\hat{p}_0$ representan a los operadores iniciales $\hat{x}$ y $\hat{p}$ al tiempo $t = 0$, de tal forma que t representa el tiempo transcurrido entre la pareja inicial $\hat{x}_0$ y $\hat{p}_0$ y la pareja $\hat{x}(t)$ y $\hat{p}(t)$. En otras palabras, t corresponde aquí a lo que en el enunciado se denotó como δt.

Tenemos, con ayuda de las reglas usuales de conmutación,

$$[\hat{x}(t), \hat{x}_0] = \frac{1}{m\omega}\,[\hat{p}_0, \hat{x}_0]\,\text{sen}\ \omega t = \frac{-i\hbar}{m\omega}\,\text{sen}\ \omega t, a \tag{XI.225}$$
$$[\hat{p}(t), \hat{p}_0] = -m\omega\,[\hat{x}_0, \hat{p}_0]\,\text{sen}\ \omega t = -im\hbar\omega\,\text{sen}\ \omega t, \tag{XI.226}$$
$$[\hat{x}(t), \hat{p}_0] = [\hat{x}_0, \hat{p}(t)] = [\hat{x}_0, \hat{p}_0]\cos\omega t = i\hbar\cos\omega t. \tag{XI.227}$$

Aplicando a estos resultados la desigualdad de Heisenberg escrita en la forma de la ecuación (T8.70),

$$\left\langle \left(\Delta\hat{A}\right)^2 \right\rangle \left\langle \left(\Delta\hat{B}\right)^2 \right\rangle \geq \tfrac{1}{4}\left|\left\langle [\hat{A}, \hat{B}] \right\rangle\right|^2, \tag{XI.228}$$

obtenemos, con $\Delta A = \left\langle \left(\Delta \hat{A}\right)^2 \right\rangle^{1/2}$,

$$\Delta x(t)\Delta x(0) \geq \frac{\hbar}{2m\omega} \left|\text{sen } \omega t\right|, \tag{XI.229}$$

$$\Delta x(t)\Delta p(0) = \Delta x(0)\Delta p(t) \geq \frac{\hbar}{2} \left|\cos \omega t\right|, \tag{XI.230}$$

$$\Delta p(t)\Delta p(0) \geq \tfrac{1}{2} m\hbar\omega \left|\text{sen } \omega t\right|. \tag{XI.231}$$

Obsérvese que las reglas de conmutación para tiempos diferentes pueden diferir sustancialmente de las usuales, y que dependen de la dinámica específica. Por ejemplo, para partícula libre ($\omega \to 0$) se reducen a $[\hat{p}(t), \hat{p}_0] = 0$, pero $[\hat{x}(t), \hat{x}_0] = -i\hbar t/m$ y $[\hat{x}(t), \hat{p}_0] = [\hat{x}_0, \hat{p}(t)] = i\hbar$.

XI.2. Problemas adicionales

* **XI.24** En la representación del operador de creación del oscilador armónico, $a^\dagger$ representa la operación de multiplicar por el número complejo $a^\dagger$, mientras que $\hat{a}$ es el operador de derivación en el espacio $a^\dagger$, de tal manera que se satisface la regla de conmutación $\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = \mathbb{I}$. Demuestre que en esta representación la función de onda del oscilador armónico es

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{i\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{n!}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-i\infty}^{i\infty} \hat{a}^{\dagger n} \exp\left[\frac{\xi^2}{2} - \sqrt{2}\xi\hat{a}^\dagger + \frac{\hat{a}^{\dagger 2}}{2}\right] d\hat{a}^\dagger.$$

Observación: esta función fue usada previamente en el problema XI.21 (ecuación (XI.194)).

La base de la representación que se desea construir es el conjunto de funciones propias del operador de creación, solución de la ecuación

$$\tfrac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) \psi_a(\xi) = a^\dagger \psi_a(\xi), \tag{XI.232}$$

donde $a^\dagger$ debe ser tratado como un número. Resolviendo se obtiene

$$\psi_a(\xi) = N(a^\dagger) e^{\xi^2/2 - \sqrt{2}\xi a^\dagger}. \tag{XI.233}$$

La constante $N(a^\dagger)$ no se puede fijar de una condición de normalización, pues $\psi_a(\xi)$ es (¡exponencialmente!) divergente, por lo que se le fija con otros criterios. Uno apropiado es el que sigue: La ecuación (XI.233) sugiere escribir el coeficiente de normalización en la forma $N(a^\dagger) = e^{\lambda a^{\dagger 2}/2}$, de tal forma que

$$\psi_a(\xi) = e^{\xi^2/2 - \sqrt{2}\xi a^\dagger + \lambda a^{\dagger 2}/2}. \tag{XI.234}$$

Mostraremos a continuación que esta selección permite garantizar que la representación de $\hat{a}$ es $\partial/\partial a^\dagger$, y que ella fija el valor 1 para el parámetro λ. Consideramos la acción del operador $\hat{a}$ como dada por la expresión (T11.42a), o bien la (XI.121)), es decir,

$$\hat{a}\psi_a(\xi) = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) \psi_a(\xi). \tag{XI.235}$$

Combinando (XI.234) y (XI.235) se obtiene

$$\begin{aligned}
\hat{a}\psi_a(\xi) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) e^{\xi^2/2-\sqrt{2}\xi a^\dagger+\lambda a^{\dagger 2}/2} \\
&= \left(\sqrt{2}\xi - \hat{a}^\dagger\right) e^{\xi^2/2-\sqrt{2}\xi a^\dagger+\lambda a^{\dagger 2}/2} \qquad \text{(XI.236)} \\
&= \left[-\frac{\partial}{\partial \hat{a}^\dagger} + (\lambda-1)\,\hat{a}^\dagger\right] e^{\xi^2/2-\sqrt{2}\xi a^\dagger+\lambda a^{\dagger 2}/2} \\
&= \left[-\frac{\partial}{\partial a^\dagger} + (\lambda-1)\,\hat{a}^\dagger\right] \psi_a(\xi). \qquad \text{(XI.237)}
\end{aligned}$$

Este resultado se reduce a

$$\hat{a}\psi_a(\xi) = -\frac{\partial}{\partial a^\dagger}\psi_a(\xi) \qquad \text{(XI.238)}$$

con la selección $\lambda = 1$; el signo $-$ puede parecer erróneo, pero debe tomarse en cuenta que el paso de (XI.236) a (XI.237) se realiza en las aplicaciones bajo un signo de integración, es decir, equivale a una integración por partes.

Un estado general $\psi(\xi)$ puede ser ahora representado en la forma (el factor $-i$ se introduce por conveniencia)

$$\psi(\xi) = \frac{-i}{\sqrt{2\pi}}\int_C f(a^\dagger) e^{\xi^2/2-\sqrt{2}\xi a^\dagger + a^{\dagger 2}/2} da^\dagger, \qquad \text{(XI.239)}$$

donde queda por especificarse la trayectoria C de integración sobre el plano complejo $a^\dagger$. Usamos esta libertad para darle sentido bien definido a esta representación, con la convención de que C corre sobre el eje imaginario, $\int_C \to \int_{-i\infty}^{i\infty}$, pero acompañada del cambio de variable $a^\dagger = i\alpha$, con α un número real. Procediendo de esta manera se obtiene

$$\psi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(i\alpha) e^{\xi^2/2-i\sqrt{2}\xi\alpha-\alpha^2/2} d\alpha. \qquad \text{(XI.240)}$$

La función $f(a^\dagger)$ es la representación en el espacio $a^\dagger$ de la función de onda $\psi(\xi)$, con esta última en el espacio de configuración. No es difícil invertir (XI.239) para obtener (véase el ejercicio XI.35)

$$f(a^\dagger) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) e^{-\xi^2/2+\sqrt{2}\xi a^\dagger - a^{\dagger 2}/2} d\xi. \qquad \text{(XI.241)}$$

Consideremos ahora una función propia del oscilador armónico, la que escribimos en la forma (cf. ecuación (T11.44))

$$\psi_n(\xi) = \frac{C_n}{C_0}\left(a^\dagger\right)^n \psi_0(\xi), \qquad \text{(XI.242)}$$

con

$$C_n = \left(\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\right)^{1/2}. \qquad \text{(XI.243)}$$

En el espacio $a^\dagger$ esto mismo se expresa en la forma

$$f_n(a^\dagger) = \frac{C_n}{C_0}\left(a^\dagger\right)^n f_0(a^\dagger), \qquad \text{(XI.244)}$$

con $f_0(a^\dagger)$ solución de la ecuación $\hat{a} f_0(a^\dagger) = 0$, es decir, $\partial f_0/\partial a^\dagger = 0$ y, por lo tanto, $f_0 = \text{const} = C_0$. Con esto, la función de onda del estado n del oscilador armónico en la representación $a^\dagger$ resulta simplemente

$$f_n(a^\dagger) = C_n \left(a^\dagger\right)^n. \tag{XI.245}$$

Insertando este resultado en (XI.239) se obtiene

$$\psi_n(\xi) = \frac{C_n}{i\sqrt{2\pi}} \int_{-i\infty}^{i\infty} \hat{a}^{\dagger n} \exp\left[\frac{\xi^2}{2} - \sqrt{2}\xi\hat{a}^\dagger + \frac{\hat{a}^{\dagger 2}}{2}\right] d\hat{a}^\dagger, \tag{XI.246}$$

que es la expresión buscada para $\psi_n(\xi)$ en términos de $f_n(a^\dagger)$.[4]

XI.25 Demuestre que en general si $\psi(x,0)$ es eigenfunción de un cierto operador $\hat{A}$ para el tiempo $t = 0$, entonces $\psi(x,t)$ es eigenfunción de $\hat{A}(-t)$ para el tiempo t con el mismo eigenvalor A. Utilice este teorema para construir la función de Green del oscilador armónico.

Consideremos un estado propio del operador $\hat{A}$ para el tiempo $t = 0$, de tal forma que se cumple que

$$\hat{A}\psi(x,0) = A\psi(x,0). \tag{XI.247}$$

Suponiendo que el hamiltoniano no depende del tiempo, escribimos la función de onda para el tiempo t en la forma $\psi(x,t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(x,0)$, lo que nos permite reescribir la ecuación anterior en la forma

$$\hat{A}e^{i\hat{H}t/\hbar}\psi(x,t) = Ae^{i\hat{H}t/\hbar}\psi(x,t), \tag{XI.248}$$

es decir,

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}e^{i\hat{H}t/\hbar}\psi(x,t) = A\psi(x,t). \tag{XI.249}$$

Pero como $e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}\ e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ es el operador $\hat{A}(t)$ para el tiempo t en la descripción de Heisenberg, (XI.249) equivale a

$$\hat{A}(-t)\psi(x,t) = A\psi(x,t). \tag{XI.250}$$

Este resultado establece en efecto que si $\psi(x,0)$ es eigenfunción de un operador $\hat{A}$ para el tiempo $t = 0$, entonces $\psi(x,t)$ es eigenfunción de $\hat{A}(-t)$ para el tiempo t con el mismo eigenvalor A.

Para construir la función de Green del oscilador armónico con base en este teorema, recordamos que la función de Green es solución de la ecuación de Schrödinger con una fuente $\delta(x - x_0)$, es decir, es una eigenfunción de $\hat{x}$ con valor propio x_0 para el tiempo $t = 0$,

$$\hat{x}G(t=0) = x_0 G(t=0). \tag{XI.251}$$

Por lo tanto, de (XI.250) sigue que para el tiempo t se cumple

$$\hat{x}(-t)G = x_0 G. \tag{XI.252}$$

De (XI.223) tenemos que para el oscilador armónico

$$\hat{x}(-t) = \hat{x}\cos\omega t - \frac{\hat{p}}{m\omega}\,\text{sen}\,\omega t, \tag{XI.253}$$

[4] Una discusión más detallada puede verse en Saxon (1968), sección 6.5.

y la ecuación anterior se transforma en

$$\left(x\cos\omega t + \frac{i\hbar}{m\omega}\,\mathrm{sen}\,\omega t\frac{\partial}{\partial x}\right)G = x_0 G. \tag{XI.254}$$

La solución de esta ecuación es

$$G(x,x_0,t) = G_0(t)\exp\left(i\frac{m\omega}{2\hbar}\cdot\frac{x^2\cos\omega t - 2x_0x}{\mathrm{sen}\,\omega t}\right). \tag{XI.255}$$

Para determinar $G_0(t)$ demandamos que $G(x,x_0,t)$ sea solución de la ecuación de Schrödinger para $t>0$; al sustituir (XI.255) en esta última, toda la dependencia en x se cancela y se obtiene una ecuación diferencial para $G_0(t)$, cuya solución es (véase ejercicio XI.44)

$$G_0(t) = \frac{C}{\sqrt{\mathrm{sen}\,\omega t}}\exp\left(i\frac{m\omega}{2\hbar}\cdot\frac{x_0^2\cos\omega t}{\mathrm{sen}\,\omega t}\right). \tag{XI.256}$$

Insertando este resultado en (XI.255) se obtiene

$$G(x,x_0,t) = \frac{C}{\sqrt{\mathrm{sen}\,\omega t}}\exp\left[i\frac{m\omega}{2\hbar}\cdot\frac{\left(x^2+x_0^2\right)\cos\omega t - 2x_0x}{\mathrm{sen}\,\omega t}\right]. \tag{XI.257}$$

Como $G(x,x_0,0)=\delta(x-x_0)$, se debe cumplir que $\int G(x,x_0,0)dx = 1$, lo que determina el valor de la constante C; se obtiene $C=\sqrt{-im\omega/2\pi\hbar}$. El resultado final es precisamente el propagador de Feynman, ecuación (XI.205).

XI.26 ¿Qué condiciones deben satisfacerse para que las dispersiones de $\hat{x}$ y $\hat{p}$ sean constantes simultáneamente, para un oscilador armónico?

De las soluciones generales (XI.223) y (XI.224) sigue de inmediato que

$$\begin{aligned}\sigma_x^2 &= \sigma_{x_0}^2\cos^2\omega t + \frac{\sigma_{p_0}^2}{m^2\omega^2}\,\mathrm{sen}^2\,\omega t \\ &\quad + \frac{1}{m\omega}\left\langle\hat{x}_0\hat{p}_0+\hat{p}_0\hat{x}_0 - 2\overline{x_0p_0}\right\rangle \mathrm{sen}\;\omega t\cos\omega t, \qquad \text{(XI.258)}\\ \sigma_p^2 &= \sigma_{p_0}^2\cos^2\omega t + m^2\omega^2\sigma_{x_0}^2\,\mathrm{sen}^2\,\omega t \\ &\quad - m\omega\left\langle\hat{x}_0\hat{p}_0+\hat{p}_0\hat{x}_0 - 2\overline{x_0p_0}\right\rangle \mathrm{sen}\;\omega t\cos\omega t. \qquad \text{(XI.259)}\end{aligned}$$

La única manera de que estas dos cantidades se hagan independientes del tiempo simultáneamente consiste en imponer las condiciones

$$\sigma_{p_0}^2 = m^2\omega^2\sigma_{x_0}^2, \tag{XI.260}$$

$$\Gamma_{x_0p_0} = \tfrac{1}{2}\left\langle\hat{x}_0\hat{p}_0+\hat{p}_0\hat{x}_0\right\rangle - \left\langle\hat{x}_0\right\rangle\left\langle\hat{p}_0\right\rangle = 0, \tag{XI.261}$$

con las que se obtiene

$$\sigma_x^2 = \sigma_{x_0}^2, \quad \sigma_p^2 = \sigma_{p_0}^2 = m^2\omega^2\sigma_x^2. \tag{XI.262}$$

Cuando $\langle\hat{x}\rangle = 0, \langle\hat{p}\rangle = 0$ la relación $\sigma_p^2 = m^2\omega^2\sigma_x^2$ se puede escribir como $\langle T\rangle = \langle V\rangle$ y equivale a demandar que el oscilador se encuentre en un estado estacionario, que satisface automáticamente el teorema del virial; la otra condición significa que las variables x y p deben estar inicialmente descorrelacionadas (en el sentido

de la ecuación (XI.261)). De (XI.262) y las desigualdades de Heisenberg sigue que $\sigma_x^2\sigma_p^2 = m^2\omega^2\sigma_x^4 \geq \hbar^2/4$, es decir, no se trata necesariamente de un paquete de mínima dispersión, pero se cumple que

$$\sigma_x^2 \geq \frac{\hbar}{2m\omega}. \tag{XI.263}$$

Escribimos ahora la energía media del paquete en la forma

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2m}\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle \hat{x}^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{2m}\sigma_p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\sigma_x^2 + \frac{1}{2m}\left(\langle \hat{p} \rangle^2 + m^2\omega^2 \langle \hat{x} \rangle^2 \right). \end{aligned} \tag{XI.264}$$

Con ayuda de las soluciones (XI.223) y (XI.224) reescribimos este resultado como

$$E = \frac{1}{2m}\left(\sigma_{p_0}^2 + m^2\omega^2\sigma_{x_0}^2\right) + \frac{1}{2m}\left(\langle \hat{p}_0 \rangle^2 + m^2\omega^2 \langle \hat{x}_0 \rangle^2 \right). \tag{XI.265}$$

El término que depende de los valores medios iniciales es arbitrario y, por lo tanto, representa una energía eliminable, de carácter extrínseco a las leyes de la mecánica cuántica. El primer término, en cambio, es imprescindible, y está asociado a las fluctuaciones cuánticas del oscilador; lo más que puede hacerse es reducirlo a su mínimo valor, que corresponde a la expresión (XI.263) con el signo de igualdad y a la energía de punto cero, como sabemos.

Consideremos ahora que en vez de (XI.260) se tiene

$$\sigma_{p_0}^2 = m^2\omega^2(1+\eta)\sigma_{x_0}^2, \quad \eta > -1, \tag{XI.266}$$

con η un parámetro libre. De aquí sigue que

$$\sigma_x^2 = \sigma_{x_0}^2\left(1 + \eta \operatorname{sen}^2 \omega t\right), \tag{XI.267}$$

$$\sigma_p^2 = m^2\omega^2\sigma_{x_0}^2\left(1 + \eta \cos^2 \omega t\right). \tag{XI.268}$$

Estas expresiones muestran que para $\eta \neq 0$ ambas dispersiones oscilan periódicamente, con un desfasamiento temporal $\pi/2\omega$.

El problema se resuelve de manera más expedita (aunque equivalente) empleando los operadores de creación y aniquilación. Por ejemplo, la ecuación de movimiento del primero de estos operadores es la ecuación (T11.61)

$$\dot{\hat{a}} + i\omega\hat{a} = 0, \tag{XI.269}$$

y tiene la solución

$$\hat{a}(t) = \hat{a}_0 e^{-i\omega t}, \quad \hat{a}_0 = \hat{a}(0). \tag{XI.270}$$

Luego se tiene que

$$\sigma_{a(t)}^2 = \sigma_{a(0)}^2 e^{-2i\omega t}. \tag{XI.271}$$

La única forma de lograr que $\sigma_{a(t)}^2 = \sigma_{a(0)}^2\ \forall t$, con $\omega \neq 0$, es que $\sigma_{a(0)}^2 = 0$, es decir,

$$\left\langle \hat{a}^2 \right\rangle_0 = \langle \hat{a} \rangle_0^2. \tag{XI.272}$$

Está claro que una forma particular de garantizar que se cumpla esta condición es que se trate de estados propios del operador de aniquilación; es decir, los estados coherentes son una solución particular, aunque importante, de este problema.

XI.27 Demuestre directamente que un estado coherente de oscilador armónico es un estado de mínima dispersión.

Sea $|\alpha\rangle$ un estado coherente de oscilador armónico con valor propio α, de tal forma que se cumple

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle\,. \tag{XI.273}$$

Usando las ecuaciones (XI.123) calculamos los valores esperados de $\hat{x}$ y $\hat{p}$ y sus cuadrados, como sigue:

$$\begin{aligned}
\langle\hat{x}\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\langle\alpha|\,\hat{a}+\hat{a}^\dagger\,|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\alpha^*+\alpha)\,, && \text{(XI.274)}\\
\langle\hat{p}\rangle &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,\langle\alpha|\,\hat{a}-\hat{a}^\dagger\,|\alpha\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,(\alpha^*-\alpha)\,, && \text{(XI.275)}\\
\langle\hat{x}^2\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\,\langle\alpha|\,\hat{a}^{\dagger 2}+\hat{a}^2+\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|\alpha\rangle\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\alpha^{*2}+\alpha^2+2\alpha^*\alpha+1\right) = \langle\hat{x}\rangle^2+\frac{\hbar}{2m\omega}, && \text{(XI.276)}\\
\langle\hat{p}^2\rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\,\langle\alpha|\,\hat{a}^{\dagger 2}+\hat{a}^2-\hat{a}\hat{a}^\dagger-\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|\alpha\rangle\\
&= \frac{m\hbar\omega}{2}\left(-\alpha^{*2}-\alpha^2+2\alpha^*\alpha+1\right) = \langle\hat{p}\rangle^2+\tfrac{1}{2}m\hbar\omega. && \text{(XI.277)}
\end{aligned}$$

De aquí se obtiene para las variancias de $\hat{x}$ y $\hat{p}$:

$$\sigma_x^2 = \langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad \sigma_p^2 = \langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{p}\rangle^2 = \tfrac{1}{2}m\hbar\omega, \tag{XI.278}$$

de donde sigue que su producto es el mínimo compatible con las desigualdades de Heisenberg:

$$\sigma_x^2\sigma_p^2 = \tfrac{1}{4}\hbar^2. \tag{XI.279}$$

De manera similar se obtiene

$$\langle\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}\rangle = i\hbar\left(\alpha^{*2}-\alpha^2\right). \tag{XI.280}$$

Combinando (XI.274) y (XI.275) vemos que los eigenvalores α de los estados coherentes están dados por

$$\alpha = \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,(m\omega\,\langle\hat{x}\rangle + i\,\langle\hat{p}\rangle)\,. \tag{XI.281}$$

De aquí sigue la relación

$$\hbar\omega\alpha^*\alpha = \frac{1}{2m}\,\langle\hat{p}\rangle^2 + \tfrac{1}{2}m\omega^2\,\langle\hat{x}\rangle^2 = \frac{1}{2m}\,\langle\hat{p}^2\rangle + \tfrac{1}{2}m\omega^2\,\langle\hat{x}^2\rangle - \tfrac{1}{2}\hbar\omega = E - \tfrac{1}{2}\hbar\omega. \tag{XI.282}$$

XI.28 Encuentre la función de transformación $\langle x\,|\alpha\rangle$ que permite pasar de los estados coherentes a la representación de coordenadas.

Podemos ver a la función $\langle x\,|\alpha\rangle$ alternativamente como un estado coherente en la descripción de coordenadas, lo que sugiere el siguiente método: Utilizando (XI.121) reescribimos la ecuación de valores propios que define a los estados coherentes en la forma

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,(m\omega\hat{x} + i\hat{p})\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle\,. \tag{XI.283}$$

De aquí sigue, multiplicando por la izquierda con $\langle x|$ y despejando,

$$\langle x|\,(m\omega\hat{x} + i\hat{p})\,|\alpha\rangle = \sqrt{2m\hbar\omega}\alpha\,\langle x\,|\alpha\rangle\,, \tag{XI.284}$$

es decir,

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{d}{dx}\right)\langle x\,|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\alpha\,\langle x\,|\alpha\rangle\,. \tag{XI.285}$$

Ésta es una ecuación diferencial para el elemento de matriz $\langle x\,|\alpha\rangle$ solicitado, cuya integral es

$$\langle x\,|\alpha\rangle = N\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\alpha x\right). \tag{XI.286}$$

N se obtiene de la condición de normalización

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty}|\langle x\,|\alpha\rangle|^2\,dx &= |N|^2\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2 + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\,(\alpha+\alpha^*)\,x\right)dx \\
&= |N|^2\,e^{(\alpha+\alpha^*)^2/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \sqrt{\tfrac{1}{2}}\,(\alpha+\alpha^*)\right)^2\right]dx \\
&= |N|^2\,e^{(\alpha+\alpha^*)^2/2}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-z^2}dz \\
&= \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}\,|N|^2\,e^{(\alpha+\alpha^*)^2/2} = 1,
\end{aligned} \tag{XI.287}$$

de donde sigue, con δ una fase real arbitraria, que

$$N = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left[-\tfrac{1}{4}\,(\alpha+\alpha^*)^2 + i\delta\right]. \tag{XI.288}$$

Por lo tanto, podemos escribir

$$\langle x\,|\alpha\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{i\delta}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\alpha x - \tfrac{1}{4}\,(\alpha+\alpha^*)^2\right]. \tag{XI.289}$$

Eliminando de esta expresión α y α^* con ayuda de (XI.274)-(XI.276), se obtiene

$$\langle x\,|\alpha\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\,(x-\langle x\rangle)^2 + i\frac{\langle p\rangle}{\hbar}x + i\delta\right]. \tag{XI.290}$$

Comparando con la ecuación (T8.78) vemos que (XI.290) describe un paquete minimal con $\sigma_x^2 = \hbar/2m\omega$, en concordancia con la ecuación (XI.278); este paquete se propaga sobre el eje Ox con momento $\langle p\rangle$. En las aplicaciones, la fase δ se elige de tal manera que la constante de normalización adquiera una forma apropiada.

Podemos tratar este problema desde un ángulo diferente, aprovechando el hecho de que los paquetes coherentes poseen dispersión mínima. En la sección 8.6 del texto se demuestra que un paquete minimal es solución de la ecuación (T8.77), que escribimos aquí en la forma

$$\left[\hat{A} - \bar{A} + i\gamma(\hat{B} - \bar{B})\right]\psi = 0, \tag{XI.291}$$

con γ un parámetro real. Esta condición la podemos reescribir alternativamente como

$$\left(\hat{A} + i\gamma\hat{B}\right)\psi = \left(\bar{A} + i\gamma\bar{B}\right)\psi \equiv \bar{C}\psi, \tag{XI.292}$$

con $\bar{C}$ un número complejo. Para la selección particular $\hat{A} = \hat{x}, \hat{B} = \hat{p}$ se obtiene

$$(\hat{x} + i\gamma\hat{p})\,\psi = \bar{C}\psi. \tag{XI.293}$$

Por otro lado, de la definición del operador de aniquilación del oscilador sigue que sus eigenfunciones satisfacen la ecuación

$$\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\hat{a}\psi = \left(\hat{x} + i\frac{1}{m\omega}\hat{p}\right)\psi = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\alpha\psi. \tag{XI.294}$$

Estas dos ecuaciones coinciden si se toma $\gamma = (m\omega)^{-1}$, $\alpha = \sqrt{m\omega/2\hbar}\bar{C}$. Con estos valores, el estado coherente descrito por (XI.294) y el paquete minimal definido con (XI.291) son la misma cosa.

XI.29 Demuestre que para obtener $|\psi(t)\rangle$ para un estado coherente de oscilador armónico basta sustituir α por $\alpha e^{-i\omega t}$, hasta un factor global de fase. Utilice este resultado para calcular el valor esperado de $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$, $\hat{x}^2(t)$, $\hat{p}^2(t)$.

Un estado coherente de oscilador armónico para el tiempo $t = 0$ está dado por la ecuación (T11.70),

$$|\psi(0)\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}\,|\varphi_n\rangle\,, \tag{XI.295}$$

donde $|\varphi_n\rangle$ son los estados estacionarios del oscilador armónico. El estado para el tiempo t se obtiene del anterior aplicando el operador de evolución $\hat{S}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$, ecuación (T9.39), con lo que resulta

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,|\varphi_n\rangle \\
&= e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}e^{-iE_nt/\hbar}\,|\varphi_n\rangle \\
&= e^{-i\omega t/2}e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n e^{-in\omega t}}{n!}\,|\varphi_n\rangle \\
&= e^{-i\omega t/2}e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\alpha e^{-i\omega t}\right)^n}{n!}\,|\varphi_n\rangle\,.
\end{aligned} \tag{XI.296}$$

Comparando, vemos que la transición de (XI.295) a (XI.296) se hace con la sustitución $\alpha \to \alpha e^{-i\omega t}$ y la posterior multiplicación del resultado por el factor

de fase global $e^{-i\omega t/2}$, el cual carece de interés físico, como sabemos. En breve se tiene, con $|\psi(\alpha)\rangle$ el estado inicial,

$$|\psi(\alpha;t)\rangle = e^{-i\omega t/2}\left|\psi(\alpha\to\alpha e^{-i\omega t})\right\rangle. \tag{XI.297}$$

Este resultado muestra que el parámetro α evoluciona con el tiempo precisamente como un oscilador armónico.

Empleando las ecuaciones (XI.274) y (XI.275) y escribiendo

$$\alpha = |\alpha|\, e^{i\phi}, \tag{XI.298}$$

sigue de inmediato que

$$\langle x(t)\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,|\alpha|\cos(\omega t-\phi), \quad \langle p(t)\rangle = m_0\frac{d\langle x(t)\rangle}{dt}. \tag{XI.299}$$

Las dispersiones resultan independientes de α y están dadas por los valores característicos para el estado base del oscilador, $\Delta x = \sqrt{\hbar/2m\omega}$, $\Delta p = \sqrt{m\hbar\omega/2}$. En otras palabras, se trata en efecto de un paquete que se conserva minimal con el transcurso del tiempo, como era de esperarse.

XI.30 Estudie el oscilador armónico en el espacio de momentos.

En la representación de momentos el operador $\hat{x}$ está dado por la ecuación (T10.28)

$$\hat{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}, \tag{XI.300}$$

por lo que el hamiltoniano del oscilador armónico unidimensional

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \tfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

toma la forma

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - \tfrac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}. \tag{XI.301}$$

La ecuación de Schrödinger en esta representación es

$$i\hbar\frac{\partial\phi(p,t)}{\partial t} = \left(\frac{p^2}{2m} - \tfrac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right)\phi(p,t). \tag{XI.302}$$

Comparando (XI.302) con la correspondiente ecuación de Schrödinger en la representación de coordenadas

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x,t), \tag{XI.303}$$

se observa que una se transforma en la otra con la sustitución

$$p \leftrightarrow m\omega x = m\omega\alpha_0\xi = \sqrt{m\hbar\omega}\,\xi. \tag{XI.304}$$

Por lo tanto, en términos de la variable adimensional

$$\eta = \frac{p}{p_0}, \quad p_0 = \sqrt{m\hbar\omega}, \tag{XI.305}$$

la correspondencia se reduce a $\eta \leftrightarrow \xi$. Usando esta correspondencia podemos escribir las soluciones propias de la ecuación (XI.302) directamente a partir de las eigenfunciones en la representación de coordenadas, ecuación (T11.30):

$$\phi_n(p) = \left(2^n n! p_0 \sqrt{\pi}\right)^{-1/2} e^{-\eta^2/2} H_n(\eta). \tag{XI.306}$$

El procedimiento seguido es legítimo porque, debido a que el sistema posee energía finita, $\phi_n(p)$ debe anularse para $|p| \to \infty$, que es una condición de frontera análoga a la que satisface la solución en el espacio de coordenadas.

La densidad de probabilidad en el espacio momental es

$$\rho_n(p,t) = \rho_n(p) = |\phi_n(p,t)|^2 = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi} p_0} e^{-(p/p_0)^2} H_n^2(p/p_0). \tag{XI.307}$$

Naturalmente, al eigenestado n corresponde la energía $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$, como es fácil verificar.

XI.31 Demuestre el "teorema de desenmarañamiento"

$$e^{\lambda(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_1 \hat{a}_2)} = e^{\alpha \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger} e^{\beta(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + 1)} e^{\alpha \hat{a}_1 \hat{a}_2}.$$

Los operadores con índice 1 y 2, respectivamente, se refieren a dos osciladores armónicos independientes (y conmutan entre sí); las funciones α y β están dadas por $\alpha = \tanh\lambda$, $\beta = \ln\cosh\lambda$.[5]

Dada la importancia de fórmulas como la anterior y sus similares, haremos una demostración un poco más general de lo estrictamente necesario. Introducimos la notación

$$\hat{f} = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger, \quad \hat{g} = -\hat{a}_1 \hat{a}_2. \tag{XI.308}$$

Lo que se desea es factorizar el operador

$$\hat{S} = e^{\lambda(\hat{f}+\hat{g})}, \tag{XI.309}$$

con $\hat{f}$ y $\hat{g}$ dos operadores que no conmutan. Un procedimiento general útil en muchos casos consiste en proponer que se puede escribir

$$e^{\lambda(\hat{f}+\hat{g})} = e^{\lambda\hat{g}} \hat{K}(\lambda) e^{\lambda\hat{f}}, \tag{XI.310}$$

en donde $\hat{K}(\lambda)$ es un operador a determinar. Este desarrollo es apropiado, en particular, cuando el operador $\hat{S}$ habrá de actuar sobre funciones propias de $\hat{f}$ (con eigenvalor f), pues en este caso la expresión (XI.310) se puede escribir en la forma

$$e^{\lambda(\hat{f}+\hat{g})}\psi_f = e^{\lambda\hat{g}} \hat{K}(\lambda) e^{\lambda\hat{f}} \psi_f = e^{\lambda\hat{g}} \hat{K}(\lambda) e^{\lambda f} \psi_f = e^{\lambda(f+\hat{g})} \hat{K}(\lambda) \psi_f,$$

con lo que la diferencia respecto al cálculo con números es sólo el factor $\hat{K}(\lambda)$.

Derivando (XI.310) respecto de λ y reordenando se llega a la ecuación diferencial

$$\frac{\partial \hat{K}}{\partial \lambda} = e^{-\lambda\hat{g}} \hat{f} e^{\lambda\hat{g}} \hat{K} - \hat{K}\hat{f}. \tag{XI.311}$$

[5] Mayores detalles pueden verse en M. J. Collet, *Phys. Rev.* **A38** (1988) 2233.

Para seguir adelante es necesario reducir el factor $e^{-\lambda\hat{g}}\hat{f}e^{\lambda\hat{g}}$. Desarrollando los exponentes y rearreglando no es difícil demostrar que se cumple que

$$e^{-\lambda\hat{g}}\hat{f}e^{\lambda\hat{g}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\lambda)^n}{n!}\hat{C}_n, \tag{XI.312}$$

en donde

$$\hat{C}_0 = \hat{f}, \quad \hat{C}_n = [\hat{g}, \hat{C}_{n-1}]. \tag{XI.313}$$

Es claro que este tratamiento es particularmente útil cuando sólo un número finito (y reducido) de coeficientes $\hat{C}_n$ es diferente de cero. Esto ocurre, en particular, en dos casos importantes que se discuten a continuación.

El caso más simple se obtiene cuando $\hat{C}_1 = [\hat{g}, \hat{f}] \equiv c$ es un número, pues entonces $\hat{C}_2 = [\hat{g}, \hat{C}_1] = 0$, etc., y resulta

$$e^{-\lambda\hat{g}}\hat{f}e^{\lambda\hat{g}} = \hat{f} - \lambda[\hat{g}, \hat{f}] = \hat{f} - c\lambda, \tag{XI.314}$$

$$\frac{\partial\hat{K}}{\partial\lambda} = -c\lambda\hat{K} \quad \Rightarrow \quad \hat{K}(\lambda) = e^{-c\lambda^2/2}, \tag{XI.315}$$

en donde se ha introducido la condición inicial $\hat{K}(0) = 1$. Se obtiene de esta manera la fórmula de Glauber

$$e^{\lambda(\hat{f}+\hat{g})} = e^{\lambda(f+\hat{g})}e^{-(\lambda^2/2)[\hat{g},\hat{f}]}, \tag{XI.316}$$

que es un caso particular de la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff.

En el caso que nos interesa la reducción ocurre porque el conjunto de operadores generados por los conmutadores $[\hat{g}, \hat{C}_n]$ es finito, de tal manera que se alcanza un punto en que los nuevos coeficientes quedan expresados en términos de operadores previos, y el cálculo se torna cíclico. Más en concreto, el resultado se puede expresar en el presente caso en términos de sólo tres operadores, como se muestra a continuación. Se tiene, con $\hat{f}$ y $\hat{g}$ dados por (XI.308),

$$[\hat{f}, \hat{g}] = \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2 + 1 \equiv \hat{h}, \tag{XI.317}$$

$$[\hat{f}, \hat{h}] = -2\hat{f}, \tag{XI.318}$$

$$[\hat{g}, \hat{h}] = 2\hat{g}. \tag{XI.319}$$

Cualquier otro conmutador queda automáticamente expresado en términos del trío de operadores $\hat{f}$, $\hat{g}$, $\hat{h}$. De aquí sigue que podemos escribir en casos como el presente

$$e^{\lambda(\hat{f}+\hat{g})} = e^{\alpha\hat{g}}e^{\beta\hat{h}}e^{\gamma\hat{f}}, \tag{XI.320}$$

con α, β y γ funciones del parámetro λ. A partir de aquí procedemos como antes, derivando esta expresión respecto de λ y reordenando para obtener

$$\hat{f} + \hat{g} = \alpha'\hat{g} + \beta' e^{\alpha\hat{g}}\hat{h}e^{-\alpha\hat{g}} + \gamma' e^{\alpha\hat{g}}e^{\beta\hat{h}}\hat{f}e^{-\beta\hat{h}}e^{-\alpha\hat{g}}. \tag{XI.321}$$

Con ayuda de (XI.312) obtenemos

$$e^{\beta\hat{h}}\hat{f}e^{-\beta\hat{h}} = \hat{f} - 2\beta\hat{f} + \frac{\beta^2}{2}[\hat{h}, \hat{f}] + \ldots = e^{-2\beta}\hat{f}, \tag{XI.322}$$

$$e^{\alpha\hat{g}}\hat{f}e^{-\alpha\hat{g}} = \hat{f} + \alpha\hat{h} - \alpha^2\hat{g}, \tag{XI.323}$$

$$e^{\alpha\hat{g}}\hat{h}e^{-\alpha\hat{g}} = \hat{h} + 2\alpha\hat{g}. \tag{XI.324}$$

Sustituyendo en (XI.321) se obtiene

$$\hat{f} + \hat{g} = \gamma' e^{2\beta}\hat{f} + (\alpha' + 2\alpha\beta' - \alpha^2\gamma' e^{2\beta})\hat{g} + (\beta' - \alpha\gamma' e^{2\beta})\hat{h},$$

de donde sigue que deben cumplirse las igualdades

$$\gamma' = e^{-2\beta}, \quad \beta' = \alpha, \quad \alpha' = -2\alpha\beta' + \alpha^2 + 1 = -\alpha^2 + 1. \tag{XI.325}$$

Las condiciones iniciales son $\alpha(0) = \beta(0) = \gamma(0) = 0$.

La ecuación $\alpha' + \alpha^2 = 1$ se resuelve simplemente poniendo $\alpha = u/v$, lo que conduce a la pareja de ecuaciones $v' = u$, $u' = v$; de aquí sigue $v'' = v$, o sea $v = Ae^{\lambda} + Be^{-\lambda}$; además

$$\alpha = \frac{u}{v} = \frac{v'}{v} = \frac{d\ln v}{d\lambda}. \tag{XI.326}$$

Sólo el cociente A/B es significativo y vale la unidad, como sigue de $\alpha(0) = 1$; por lo tanto

$$\alpha = \tanh\lambda. \tag{XI.327}$$

Tenemos ahora

$$\beta' = \alpha = \frac{d\ln v}{d\lambda},$$

de donde sigue

$$\beta = \beta_0 + \ln\cosh\lambda. \tag{XI.328}$$

La condición inicial demanda que $\beta_0 = 0$. Con esto se obtiene

$$\gamma' = e^{-2\beta} = e^{-2\ln\cosh\lambda} = \frac{1}{\cosh^2\lambda}. \tag{XI.329}$$

Por otra parte,

$$\alpha' = 1 - \alpha^2 = 1 - \tanh^2\lambda = \frac{1}{\cosh^2\lambda} = \gamma',$$

lo que da finalmente, tomando en cuenta el valor inicial,

$$\alpha = \gamma = \tanh\lambda, \quad \beta = \ln\cosh\lambda. \tag{XI.330}$$

Estos resultados corresponden precisamente a lo que establece el teorema de desenmarañamiento.

XI.3. Ejercicios

XI.32 Demuestre que la paridad de los polinomios de Hermite $H_n(x)$, es $(-1)^n$.

XI.33 Las vibraciones de pequeña amplitud en moléculas diatómicas pueden ser estudiadas empleando como modelo para el potencial vibracional molecular el potencial del oscilador armónico, $V(x) = \frac{1}{2}k_f x^2$, con k_f la constante de fuerza. Para una molécula diatómica típica, $k_f \simeq 1 \times 10^3$ J·m^{-2}.

a) Utilice este dato para estimar el valor de la energía vibracional de punto cero.

b) Estime el espaciamiento, en energía, entre dos estados sucesivos.

XI.34 Verifique que el propagador de Feynman para el oscilador armónico tiende al de partícula libre cuando $\omega \to 0$. ¿Por qué ocurre lo mismo para ω fija ($< \infty$) cuando $t - t' \to 0$?

XI.35 Demuestre que la inversa de la expresión (XI.240) se puede escribir en la forma

$$f(\alpha)e^{-\alpha^2/2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) e^{-\xi^2/2 + i\sqrt{2}\xi\alpha} d\xi.$$

XI.36 Determine los valores propios de la energía que corresponden a la ecuación de Schrödinger unidimensional con el potencial

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, & x > 0; \\ +\infty, & x < 0. \end{cases}$$

XI.37 Calcule la probabilidad de que las partículas se encuentren dentro de la zona clásicamente permitida para los estados propios del oscilador armónico y determine el valor de esta probabilidad para el estado base.

Observación: $\mathrm{erf}(1) = 0.8427\ldots$

XI.38 Dos partículas de masa m_1 y m_2 que se mueven sobre una recta interaccionan con el potencial $V(x_1, x_2) = a(x_1 - x_2) + b(x_1 - x_2)^2$, $b > 0$. Determine las energías propias y las correspondientes funciones de onda.

XI.39 Calcule $\langle n \mid \hat{x}^4 \mid n \rangle$ para el oscilador armónico utilizando los operadores de creación y aniquilación.

XI.40 Demuestre que si $f(\hat{a}^\dagger)$ es un polinomio en $\hat{a}^\dagger$, entonces

$$\hat{a} f(\hat{a}^\dagger) |0\rangle = \frac{df(\hat{a}^\dagger)}{d\hat{a}^\dagger} |0\rangle ,$$
$$e^{\lambda a} f(\hat{a}^\dagger) |0\rangle = f(\hat{a}^\dagger + \lambda) |0\rangle .$$

XI.41 Demuestre que

$$e^{\alpha\hat{a} + \beta\hat{a}^\dagger} = e^{\alpha\hat{a}} e^{\beta\hat{a}^\dagger} e^{-\alpha\beta\hbar/2}.$$

XI.42 Un oscilador unidimensional se mueve en el campo eléctrico externo generado por el potencial $-e\mathcal{E}x(t)$. a) Establezca las ecuaciones de movimiento para $\hat{x}(t)$ y $\hat{p}(t)$ y muestre que tienen precisamente la forma de las correspondientes ecuaciones clásicas. b) Resuelva para $\hat{x}(t)$ y $\hat{p}(t)$ en función de $\hat{x}(0)$ y $\hat{p}(0)$. c) Determine las relaciones de conmutación $[x(t_1), x(t_2)]$ para $t_1 - t_2$ arbitraria. Este último resultado muestra que operadores que conmutan a tiempos iguales no necesariamente lo hacen a tiempos diferentes.

XI.43 Determine ψ_1 y ψ_2 para el oscilador armónico a partir de la expresión (T11.44),

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0(x).$$

XI.44 Determine detalladamente la función $G_0(t)$ que aparece en la ecuación (XI.256); para ello, resuelva la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para el oscilador armónico.

XI.45 Calcule el producto escalar $\langle\beta\,|\alpha\rangle$ de dos estados coherentes del oscilador armónico, y muestre que tales estados no son ortogonales para $\alpha \neq \beta$. Esto se debe a que los estados coherentes son estados propios del operador de aniquilación, que no es ni hermitiano ni normal (es decir, no conmuta con su adjunto). Muestre que si se pone $|\alpha|^2 = E_{\text{clás}}/\hbar\omega$, etc., cuando $\hbar \to 0$ el traslape tiende a cero.

XI.46 Un oscilador armónico lineal se encuentra en el tiempo $t = 0$ en un estado descrito por la función de onda normalizada

$$\psi\,(x,0) = \tfrac{1}{\sqrt{5}}\psi_0 + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\psi_2 + c_3\psi_3,$$

con ψ_n, eigenfunciones del oscilador armónico.

a) Determine el valor del coeficiente c_3, suponiendo que es real y positivo.

b) Obtenga la función de onda para un tiempo $t > 0$ arbitrario.

c) ¿Cuál es el valor esperado de la energía en $t = 0$ y en $t > 0$?

XI.47 Un oscilador armónico de masa m, carga e y frecuencia ω se encuentra en su estado base en un campo eléctrico uniforme. En el tiempo $t = 0$, se desconecta de manera abrupta el campo eléctrico.

a) Usando las propiedades del propagador, encuentre una expresión cerrada y exacta para el estado del sistema para cualquier tiempo $t > 0$. Compare los resultados con los del correspondiente oscilador clásico.

b) Calcule la probabilidad de que el oscilador esté en su n-ésimo estado en el tiempo $t > 0$.

XI.48 Establezca el método de los operadores de creación y aniquilación para el oscilador armónico, a partir de la descripción del sistema en el espacio momental.

XI.49 Demuestre detalladamente la fórmula (XI.312) y el resto de ecuaciones hasta la (XI.319).

XI.50 Obtenga las ecuaciones de evolución para $\langle\hat{x}\rangle$ y $\langle\hat{p}\rangle$ para sistemas con hamiltonianos

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\omega^2x^2 + \beta x + \mathcal{E}\right), \tag{XI.331}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - \frac{A}{x^2}. \tag{XI.332}$$

Resuelva las ecuaciones para el primer caso.

XII. Introducción a la teoría del momento angular

XII.1. Problemas del texto

XII.1 Demuestre, a partir de la definición $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$, que los operadores de momento angular $\hat{L}_i$, $i = 1, 2, 3$, son hermitianos.

Las componentes cartesianas del momento angular son[1]

$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k = -i\hbar \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}. \tag{XII.1}$$

Consideremos dos funciones $\psi(\mathbf{x})$ y $\varphi(\mathbf{x})$ de cuadrado integrable. Mediante una integración por partes podemos escribir (abreviamos $\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty}$ con $\int_{-\infty}^{\infty}$)

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{L}_i \varphi \, d^3x &= -i\hbar \varepsilon_{ijk} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \varphi \, d^3x \\
&= -i\hbar \varepsilon_{ijk} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\psi^* x_j \varphi \right) d^3x \right. \\
&\quad \left. - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \psi^* \right) x_j \varphi \, d^3x - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \delta_{jk} \varphi \, d^3x \right] \\
&= i\hbar \varepsilon_{ijk} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \psi^* d^3x = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi \hat{L}_i^* \psi^* d^3x \,.
\end{aligned} \tag{XII.2}$$

En lo anterior se ha considerado que las funciones se anulan suficientemente rápido en el infinito para escribir $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\psi^* x_j \varphi \right) d^3x = \psi^* x_j \varphi |_{-\infty}^{+\infty} = 0$. El resultado muestra que cada componente cartesiana $\hat{L}_i$ del operador de momento angular satisface la propiedad (T8.19) que define a los operadores hermitianos.

XII.2 Derive detalladamente la ecuación (T12.3).

Se desea demostrar que el operador de momento angular orbital se expresa en coordenadas esféricas en la forma

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar \left(\hat{\mathbf{a}}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\mathbf{a}}_\theta \frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \tag{XII.3}$$

[1] Para mayor claridad en la escritura omitiremos en el presente capítulo el signo de suma sobre índices repetidos.

La relación entre las coordenadas cartesianas y las esféricas es

$$\begin{aligned} x &= r\ \text{sen}\,\theta\cos\varphi, \\ y &= r\ \text{sen}\,\theta\ \text{sen}\,\varphi, \\ z &= r\cos\theta, \end{aligned} \tag{XII.4}$$

y los vectores unitarios en las direcciones de los ejes cartesianos están dados por

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}_x &= \hat{\mathbf{a}}_r\ \text{sen}\,\theta\cos\varphi + \hat{\mathbf{a}}_\theta\cos\theta\cos\varphi - \hat{\mathbf{a}}_\varphi\ \text{sen}\,\varphi, \\ \hat{\mathbf{a}}_y &= \hat{\mathbf{a}}_r\ \text{sen}\,\theta\ \text{sen}\,\varphi + \hat{\mathbf{a}}_\theta\cos\theta\ \text{sen}\,\varphi + \hat{\mathbf{a}}_\varphi\cos\varphi, \\ \hat{\mathbf{a}}_z &= \hat{\mathbf{a}}_r\cos\theta - \hat{\mathbf{a}}_\theta\ \text{sen}\,\varphi. \end{aligned} \tag{XII.5}$$

A su vez, los operadores de derivación parcial sobre los ejes cartesianos pueden expresarse como sigue:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \text{sen}\,\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\left(\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\text{sen}\,\varphi}{\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \text{sen}\,\theta\ \text{sen}\,\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\left(\cos\theta\ \text{sen}\,\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\ \text{sen}\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}. \end{aligned} \tag{XII.6}$$

El operador de momento angular expresado en coordenadas cartesianas es

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\hat{\mathbf{a}}_x + \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\hat{\mathbf{a}}_y + \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\hat{\mathbf{a}}_z\right]. \tag{XII.7}$$

Sustituyendo aquí las expresiones anteriores y factorizando, se obtiene directamente la ecuación T12.3 solicitada.

XII.3 Calcule el coeficiente de normalización de los armónicos esféricos $Y_l^m(\theta,\varphi)$, definidos con la ecuación (T12.52).

En coordenadas esféricas los armónicos esféricos se factorizan en la forma

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = AP_l^m\left(\cos\theta\right)e^{im\varphi}, \tag{XII.8}$$

donde $P_l^m\left(x\right)$ es un polinomio asociado de Legendre. El problema consiste en determinar la constante A para que se cumpla la condición de normalización

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} Y_l^{m*}(\theta,\varphi)Y_l^m(\theta,\varphi)\ \text{sen}\,\theta d\theta = 1. \tag{XII.9}$$

Sustituyendo (XII.8) en (XII.9) y haciendo el cambio de variable $\cos\theta = x$, queda

$$\begin{aligned} AA^*\int_0^{2\pi} e^{i(m-m)\varphi}d\varphi \int_0^{\pi} P_l^{m*}\left(\cos\theta\right)P_l^m\left(\cos\theta\right)\text{sen}\,\theta d\theta \\ = 2\pi\left|A\right|^2\int_{-1}^{1}\left[P_l^m(x)\right]^2 dx = 1, \end{aligned} \tag{XII.10}$$

en donde se tomó en cuenta que las funciones $P_l^m(x)$ son reales. Los polinomios asociados de Legendre de igual m son ortogonales respecto del índice l, y se

definen usualmente de tal forma que se cumpla la condición (T12.47), es decir,[2]

$$\int_{-1}^{1} P_{l'}^{m}(x)\, P_{l}^{m}(x)\, dx = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{ll'}. \tag{XII.11}$$

Aceptando esta definición, de (XII.10) resulta, si se toma A como real y positiva,

$$A = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}. \tag{XII.12}$$

En los textos de física es frecuente la introducción de un factor extra de fase $(-1)^m$, llamado con frecuencia (entre los físicos) *fase de Condon-Shortley*. Con esta convención los armónicos esféricos normalizados resultan

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)\,(l-m)!}{4\pi\,(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}. \tag{XII.13}$$

XII.4 Demuestre que el momento orbital total de un sistema de dos partículas puede expresarse en términos de las variables CM y relativas en la forma

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{R}}\times\hat{\mathbf{P}} + \hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}},$$

donde

$$\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2, \qquad \hat{\mathbf{p}} = m\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_1}{m_1} - \frac{\hat{\mathbf{p}}_2}{m_2}\right), \qquad m = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2},$$

$$\hat{\mathbf{R}} = \frac{m_1\hat{\mathbf{r}}_1 + m_2\hat{\mathbf{r}}_2}{M}, \qquad \hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2, \qquad M = m_1 + m_2.$$

El momento angular total de un sistema de dos partículas es

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}}_1\times\hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{r}}_2\times\hat{\mathbf{p}}_2, \tag{XII.14}$$

por lo que el correspondiente operador de momento angular se escribe en la forma

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\left(\mathbf{r}_1\times\nabla_1 + \mathbf{r}_2\times\nabla_2\right). \tag{XII.15}$$

Las variables relativa $\hat{\mathbf{r}}$ y de centro de masa $\hat{\mathbf{R}}$ se definen de manera similar a la clásica, es decir,

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{M}, \tag{XII.16}$$

donde $M = m_1 + m_2$ es la masa total del sistema. Invirtiendo estas expresiones se obtiene

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2}{M}\mathbf{r}, \qquad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1}{M}\mathbf{r}, \tag{XII.17}$$

$$\nabla_1 = \frac{m_1}{M}\nabla_R + \nabla_r, \qquad \nabla_2 = \frac{m_2}{M}\nabla_R - \nabla_r. \tag{XII.18}$$

[2]La condición (XII.11) puede variar de un autor a otro, por lo que debe tenerse cuidado al comparar resultados.

Sustituyendo los resultados anteriores en (XII.15) se obtiene

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}} &= -i\hbar\left[\left(\mathbf{R}+\frac{m_2}{M}\mathbf{r}\right)\times\left(\frac{m_1}{M}\nabla_R+\nabla_r\right)+\left(\mathbf{R}-\frac{m_1}{M}\mathbf{r}\right)\times\left(\frac{m_2}{M}\nabla_R-\nabla_r\right)\right]\\ &= -i\hbar\left(\mathbf{R}\times\nabla_R+\mathbf{r}\times\nabla_r\right). \qquad \text{(XII.19)}\end{aligned}$$

Este resultado sugiere definir un momento (lineal) total (asociado a la coordenada $\hat{\mathbf{R}}$ del CM y a la masa total M), y un momento relativo (asociado a la velocidad relativa $\hat{\mathbf{p}}_1/m_1-\hat{\mathbf{p}}_2/m_2$ y a la masa reducida $m=m_1m_2/M$), como sigue:

$$\hat{\mathbf{P}}=\hat{\mathbf{p}}_1+\hat{\mathbf{p}}_2=-i\hbar(\nabla_1+\nabla_2)=-i\hbar\nabla_R, \qquad \text{(XII.20)}$$

$$\hat{\mathbf{p}}=m\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_1}{m_1}-\frac{\hat{\mathbf{p}}_2}{m_2}\right)=-i\hbar\left(\frac{m_2}{M}\nabla_1-\frac{m_1}{M}\nabla_2\right)=-i\hbar\nabla_r. \qquad \text{(XII.21)}$$

En términos de estas cantidades (XII.19) se transforma en

$$\hat{\mathbf{L}}=\hat{\mathbf{R}}\times\hat{\mathbf{P}}+\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}}, \qquad \text{(XII.22)}$$

que es lo que tenía que demostrarse.

XII.5 Demuestre que los momentos angulares relativo y CM del problema anterior son independientes y satisfacen las relaciones canónicas de conmutación. Demuestre además que estas últimas se pueden escribir en la forma

$$\hat{\mathbf{L}}_{CM}\times\hat{\mathbf{L}}_{CM}=i\hbar\hat{\mathbf{L}}_{CM},\quad \hat{\mathbf{L}}_r\times\hat{\mathbf{L}}_r=i\hbar\hat{\mathbf{L}}_r.$$

Explique si es posible clasificar los estados angulares de dos partículas mediante los números cuánticos $\mathbf{L}^2_{CM}$, L_{CMz}, $\mathbf{L}^2_r$, L_{rz}.

La razón por la que se cumplen las reglas usuales de conmutación por separado para el centro de masa y el movimiento relativo, es que estos dos sistemas son independientes. Esto lo podemos comprobar mostrando, por ejemplo, que los conmutadores $\left[\hat{x}_i,\hat{R}_j\right]$, $\left[\hat{x}_i,\hat{P}_j\right]$, $\left[\hat{p}_i,\hat{R}_j\right]$, $\left[\hat{p}_i,\hat{P}_j\right]$ son idénticamente iguales a cero. En efecto, usando las definiciones dadas en el problema anterior se tiene, por ejemplo, con $\hat{X}_i$ y $\hat{x}_i$ las componentes de $\hat{\mathbf{R}}$ y de $\hat{\mathbf{r}}$, respectivamente, (véanse ecuaciones (T13.19))

$$\begin{aligned}\left[\hat{x}_i,\hat{P}_j\right] &= -i\hbar\left(x_i\frac{\partial}{\partial X_j}-\frac{\partial}{\partial X_j}x_i\right)=i\hbar\left(\frac{\partial x_i}{\partial X_j}\right)\\ &= i\hbar\left[\left(\frac{\partial}{\partial x_{1j}}+\frac{\partial}{\partial x_{2j}}\right)(x_{1i}-x_{2i})\right]=i\hbar\left(\delta_{ij}-\delta_{ij}\right)=0, \qquad \text{(XII.23)}\end{aligned}$$

etc. Esta propiedad permite tratar por separado a los dos juegos de variables, y de (XII.20) y (XII.21) siguen de inmediato las reglas usuales de conmutación para el momento angular CM y relativo.

El cálculo directo confirma, naturalmente, lo anterior. Para ver esto denotamos las componentes de $\hat{\mathbf{L}}_{CM}$ con $\mathcal{L}_i$ y las de $\hat{\mathbf{L}}_r$ con $\mathbb{L}_i$. De (XII.19) sigue que

$$\mathcal{L}_i=\varepsilon_{irs}\hat{X}_r\hat{P}_s=-i\hbar\varepsilon_{irs}X_r\frac{\partial}{\partial X_s}, \qquad \text{(XII.24)}$$

$$\mathbb{L}_i=\varepsilon_{irs}\hat{x}_r\hat{p}_s=-i\hbar\varepsilon_{irs}x_r\frac{\partial}{\partial x_s}. \qquad \text{(XII.25)}$$

Tenemos, por ejemplo,

$$\begin{aligned}[\mathcal{L}_1,\mathcal{L}_2] &= \mathcal{L}_1\mathcal{L}_2-\mathcal{L}_2\mathcal{L}_1=\left[\mathcal{L}_1,\hat{Z}\hat{P}_1\right]-\left[\mathcal{L}_1,\hat{X}\hat{P}_3\right]\\ &= \left[\mathcal{L}_1,\hat{Z}\right]\hat{P}_1-\hat{X}\left[\mathcal{L}_1,\hat{P}_3\right]=-i\hbar\left(\hat{Y}\hat{P}_1-\hat{X}\hat{P}_2\right)=i\hbar\mathcal{L}_3,\end{aligned} \tag{XII.26}$$

y así sucesivamente. De la primera y última igualdad en (XII.26) sigue que estas reglas de conmutación se pueden sintetizar en las reglas formales

$$\mathcal{L}\times\mathcal{L}=i\hbar\mathcal{L},\quad \mathbb{L}\times\mathbb{L}=i\hbar\mathbb{L}. \tag{XII.27}$$

Es claro que también se cumplen las reglas de conmutación

$$\left[\mathcal{L}^2,\mathcal{L}_i\right]=0,\quad \left[\mathbb{L}^2,\mathbb{L}_i\right]=0. \tag{XII.28}$$

Es interesante calcular conmutadores mixtos del tipo

$$[\mathcal{L}_1,\mathbb{L}_2]=[\mathcal{L}_1,\hat{z}\hat{p}_1]-[\mathcal{L}_1,\hat{x}\hat{p}_3]\,.$$

Como las variables en mayúsculas (CM) y en minúsculas (relativas) conmutan entre sí, cada uno de estos conmutadores es nulo y se obtiene, generalizando,

$$[\mathcal{L}_i,\mathbb{L}_j]=0. \tag{XII.29}$$

De los resultados anteriores se concluye que es posible construir estados propios simultáneos de los operadores $\mathcal{L}^2,\mathcal{L}_z,\ \mathbb{L}^2,\mathbb{L}_z$, descritos por el vector $|\alpha\mathcal{L}\mathcal{L}_3\mathbb{L}\mathbb{L}_3\rangle$. El parámetro α denota cualquier otro conjunto de números cuánticos requeridos para completar la descripción del ket.

XII.6 Muestre que si

$$\hat{p}_r^2=-\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right),$$

las siguientes expresiones son correctas:

$$\hat{p}_r^2=\frac{1}{r^2}\left[(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}})^2-i\hbar\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right],$$
$$\hat{p}_r=\frac{1}{r}\left(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}}-i\hbar\right).$$

Se tiene, por definición,

$$\hat{p}_r^2=-\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)=-\frac{\hbar^2}{r^2}\left[r\frac{\partial}{\partial r}+r\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]. \tag{XII.30}$$

Como

$$\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}}=-i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}, \tag{XII.31}$$

sustituyendo en (XII.30) se obtiene directamente el primero de los resultados solicitados,

$$\hat{p}_r^2=\frac{1}{r^2}\left[(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}})^2-i\hbar\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right]. \tag{XII.32}$$

De (XII.31) sigue también que

$$(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}})^2 = -\hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) = -\hbar^2 r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}, \tag{XII.33}$$

que se puede reescribir en la siguiente forma, que resulta útil con frecuencia,

$$(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}})^2 + i\hbar\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}} = -\hbar^2 r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}. \tag{XII.34}$$

De la ecuación (XII.32) sigue

$$\begin{aligned}\hat{p}_r^2 &= \frac{1}{r^2}\left[(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}})^2 - i\hbar\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right] = \frac{1}{r^2}(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}})(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}} - i\hbar)\\ &= \frac{1}{r}(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}} - i\hbar)\frac{1}{r}(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}} - i\hbar),\end{aligned} \tag{XII.35}$$

en donde se tomó en cuenta que

$$\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\frac{1}{r} = \frac{1}{r}(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + i\hbar), \tag{XII.36}$$

como es fácil verificar. La ecuación (XII.35) muestra que, en efecto,

$$\hat{p}_r = \frac{1}{r}(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}} - i\hbar). \tag{XII.37}$$

XII.7 Demuestre que $\hat{p}_r$ es el momento canónico conjugado de la variable r, es decir, que se cumple

$$[\hat{r}, \hat{p}_r] = i\hbar.$$

El momento $\hat{p}_r$ canónicamente conjugado a la variable r está dado por la ecuación (XII.37),

$$\hat{p}_r = \frac{1}{r}(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}} - i\hbar) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right). \tag{XII.38}$$

De aquí sigue

$$[\hat{r}, \hat{p}_r] = -i\hbar\left[r, \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right] = -i\hbar\left[r, \frac{\partial}{\partial r}\right],$$

que efectivamente se reduce a la regla canónica

$$[\hat{r}, \hat{p}_r] = i\hbar. \tag{XII.39}$$

Obsérvese que desde el punto de vista exclusivo de la regla de conmutación, el momento conjugado canónico de la variable r es de la forma general $\partial/\partial r + f(r)$, donde f es una función diferenciable, pero arbitraria; en particular, pudiera ser $f = 0$. El valor de esta función se fija unívocamente con la teoría expuesta en los problemas anteriores. Más en general, de (XII.39) sigue que

$$[\hat{p}_r, g(r)] = -i\hbar\frac{\partial g}{\partial r}. \tag{XII.40}$$

XII.8 Demuestre que no existe solución para el problema de valores propios $\hat{p}_r R(r) = \alpha R(r)$ que satisfaga la condición $\lim_{r\to 0} rR(r) = 0$. ¿Qué se concluye de aquí?

Usando (XII.38), la ecuación de valores propios

$$\hat{\mathbf{p}}_r \mathbf{R} = \alpha \mathbf{R} \tag{XII.41}$$

resulta

$$\frac{\partial R}{\partial r} + \frac{R}{r} = \frac{i\alpha}{\hbar} R. \tag{XII.42}$$

La solución general de esta ecuación es

$$R = \frac{C}{r} \exp\left(\frac{i\alpha}{\hbar} r\right), \tag{XII.43}$$

donde C es la constante de normalización. De (XII.43) sigue que

$$\lim_{r\to 0} rR = C, \tag{XII.44}$$

que es distinta de cero para $R \neq 0$. Luego no existe eigenfunción de $\hat{p}_r$ que satisfaga la condición $\lim_{r\to 0} rR = 0$. Como además resulta que $\lim_{r\to 0} R = \infty$, la función R dada por (XII.43) no califica como función de onda físicamente aceptable para $C \neq 0$.

Una consecuencia inmediata de este resultado es que no existen eigenestados del operador $\hat{p}_r$ físicamente aceptables, es decir, que el momento radial (canónicamente conjugado a r) no puede fijarse. Es interesante comparar con el caso clásico, en el que es posible construir órbitas circulares para el problema de Kepler para las que p_r se anula (y por lo tanto es fijo). Luego, estrictamente hablando, no existen soluciones cuánticas que correspondan a las órbitas circulares clásicas. Es importante tener esto en cuenta, pues en relación con problemas atómicos se hablará más adelante de "órbitas circulares"; debe quedar claro el sentido convencional de este lenguaje.

XII.9 Demuestre directamente que

$$\left[\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{r}}\right] = -i\hbar \left(\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{r}}\right),$$
$$\left[\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{p}}\right] = -i\hbar (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{p}}),$$
$$\left[\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{L}}\right] = -i\hbar (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{L}}).$$

En las expresiones anteriores, $\hat{\mathbf{n}}$ es un vector unitario en dirección arbitraria.

Representamos el vector $\hat{\mathbf{n}}$ en la forma $\hat{\mathbf{n}} = \sum_i \alpha_i \hat{\mathbf{e}}_i$, con $\{\hat{\mathbf{e}}_i\}$ una base cartesiana tridimensional. Con las componentes $\hat{L}_i$ del momento angular orbital dadas por la ecuación (XII.1) podemos escribir

$$\begin{aligned} \left[\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \hat{x}_j\right] &= \left[\alpha_i \hat{L}_i, \hat{x}_j\right] = -i\hbar\alpha_i \varepsilon_{ilm} x_l \left(\frac{\partial}{\partial x_m} x_j - x_j \frac{\partial}{\partial x_m}\right) \\ &= -i\hbar\varepsilon_{ilj}\alpha_i x_l = -i\hbar \left(\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{r}}\right)_j . \end{aligned} \tag{XII.45}$$

De aquí sigue

$$\left[\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{r}}\right] = -i\hbar \left(\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{r}}\right). \tag{XII.46}$$

De manera análoga se obtiene

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{L}},\hat{p}_j\right] &= \left[\alpha_i\hat{L}_i,\hat{p}_j\right] = -i\hbar\alpha_i\left(\hat{L}_i\frac{\partial}{\partial x_j}-\frac{\partial}{\partial x_j}\hat{L}_i\right)\\ &= -\hbar^2\varepsilon_{jim}\alpha_i\frac{\partial}{\partial x_m} = -i\hbar\varepsilon_{jim}\alpha_i\hat{p}_m = -i\hbar\left(\hat{\mathbf{n}}\times\hat{\mathbf{p}}\right)_j, \quad \text{(XII.47)}\end{aligned}$$

cuya versión vectorial es

$$\left[\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{L}},\hat{\mathbf{p}}\right] = -i\hbar\left(\hat{\mathbf{n}}\times\hat{\mathbf{p}}\right). \quad \text{(XII.48)}$$

Por último, tenemos

$$\left[\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{L}},\hat{L}_j\right] = \alpha_i\left[\hat{L}_i,\hat{L}_j\right] = -i\hbar\varepsilon_{jil}\alpha_i\hat{L}_l = -i\hbar\left(\hat{\mathbf{n}}\times\hat{\mathbf{L}}\right)_j, \quad \text{(XII.49)}$$

es decir,

$$\left[\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{L}},\hat{\mathbf{L}}\right] = -i\hbar\left(\hat{\mathbf{n}}\times\hat{\mathbf{L}}\right). \quad \text{(XII.50)}$$

XII.10 Demuestre que

$$\hat{\mathbf{p}}\times\hat{\mathbf{L}}+\hat{\mathbf{L}}\times\hat{\mathbf{p}} = 2i\hbar\hat{\mathbf{p}},$$

y que

$$\left[\hat{\mathbf{p}},\hat{\mathbf{L}}^2\right] = i\hbar\left(\hat{\mathbf{L}}\times\hat{\mathbf{p}}-\hat{\mathbf{p}}\times\hat{\mathbf{L}}\right).$$

Consideramos una componente cartesiana de las expresiones anteriores. Para la primera escribimos, por ejemplo,

$$\left(\hat{\mathbf{p}}\times\hat{\mathbf{L}}\right)_z = \hat{p}_x\hat{L}_y-\hat{p}_y\hat{L}_x; \quad \left(\hat{\mathbf{L}}\times\hat{\mathbf{p}}\right)_z = \hat{L}_x\hat{p}_y-\hat{L}_y\hat{p}_x. \quad \text{(XII.51)}$$

Sumando ambas igualdades se obtiene

$$\left(\hat{\mathbf{p}}\times\hat{\mathbf{L}}+\hat{\mathbf{L}}\times\hat{\mathbf{p}}\right)_z = \left[\hat{p}_x,\hat{L}_y\right]-\left[\hat{p}_y,\hat{L}_x\right]. \quad \text{(XII.52)}$$

Para simplificar usamos las ecuaciones (T12.9), que son la versión componente a componente de la ecuación (XII.48),

$$\left[\hat{L}_x,\hat{p}_y\right] = -\left[\hat{L}_y,\hat{p}_x\right] = i\hbar\hat{p}_z, \quad \text{etc.}, \quad \text{(XII.53)}$$

o bien, en general,

$$\left[\hat{p}_i,\hat{L}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k. \quad \text{(XII.54)}$$

Se obtiene

$$\left(\hat{\mathbf{p}}\times\hat{\mathbf{L}}+\hat{\mathbf{L}}\times\hat{\mathbf{p}}\right)_z = 2i\hbar\hat{p}_z. \quad \text{(XII.55)}$$

Las correspondientes expresiones para las componentes sobre los ejes Ox y Oy se obtienen de manera análoga. Pasando a notación vectorial, queda finalmente

$$\hat{\mathbf{p}}\times\hat{\mathbf{L}}+\hat{\mathbf{L}}\times\hat{\mathbf{p}} = 2i\hbar\hat{\mathbf{p}}. \quad \text{(XII.56)}$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathbf{p}},\hat{\mathbf{L}}^2\right]_i &= \left[\hat{p}_i,\hat{L}_j\hat{L}_j\right] = \left[\hat{p}_i,\hat{L}_j\right]\hat{L}_j+\hat{L}_j\left[\hat{p}_i,\hat{L}_j\right]\\ &= i\hbar\varepsilon_{ijk}\left(\hat{p}_k\hat{L}_j+\hat{L}_j\hat{p}_k\right) = i\hbar\left(\varepsilon_{ijk}\hat{L}_j\hat{p}_k-\varepsilon_{ikj}\hat{p}_k\hat{L}_j\right). \quad \text{(XII.57)}\end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{L}}^2\right]_i = i\hbar \left[\left(\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}\right)_i - \left(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}}\right)_i\right], \tag{XII.58}$$

que en notación vectorial es

$$\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{L}}^2\right] = i\hbar(\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}}). \tag{XII.59}$$

En el ejercicio XII.69 se estudian problemas como el presente desde una perspectiva más general.

XII.11 Deduzca detalladamente las relaciones de conmutación (T12.74)–(T12.76) y demuestre las ecuaciones (T12.77) y (T12.78).

Se trata de obtener las siguientes expresiones importantes:

$$\left[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_\pm\right] = 0, \tag{XII.60}$$

$$\left[\hat{J}_z, \hat{J}_+\right] = \hbar \hat{J}_+, \tag{XII.61}$$

$$\left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = \hbar \hat{J}_z; \tag{XII.62}$$

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = \tfrac{1}{2}\left[\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z\left(\hat{J}_z - \hbar\right)\right], \tag{XII.63}$$

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = \tfrac{1}{2}\left[\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z\left(\hat{J}_z + \hbar\right)\right]. \tag{XII.64}$$

Partimos de las relaciones de conmutación de los operadores de momento angular, ecuaciones (T12.67) y (T12.68),[3]

$$\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k, \tag{XII.65}$$

$$\left[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_i\right] = 0, \tag{XII.66}$$

y de la definición de los operadores de ascenso y descenso de la proyección de momento angular, dados por las ecuaciones (T12.73)

$$\hat{J}_\pm \equiv \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y\right). \tag{XII.67}$$

De estas expresiones es inmediato que

$$\left[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_\pm\right] = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_x\right] \pm i\left[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_y\right]\right\} = 0,$$

mientras que

$$\left[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right] \pm i\left[\hat{J}_z, \hat{J}_y\right]\right\} = \pm\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y\right) = \pm\hbar\hat{J}_\pm.$$

Por otro lado,

$$\left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = \tfrac{1}{2}\left\{\left[\hat{J}_x, \hat{J}_x\right] - i\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] + i\left[\hat{J}_y, \hat{J}_x\right] + \left[\hat{J}_y, \hat{J}_y\right]\right\},$$

[3]La ecuación (XII.66) muestra que el operador $\hat{\mathbf{J}}^2$ conmuta con todos los generadores $\hat{J}_i$ del grupo de rotaciones; como cualquier operador de este grupo es función de estos generadores, sigue que $\hat{\mathbf{J}}^2$ conmuta con todos los operadores del grupo. Los operadores (de un semigrupo de Lie) que poseen esta propiedad se conocen como *operadores invariantes* o *de Casimir*. El grupo de rotaciones posee sólo un operador de Casimir (por lo que se dice que es de rango 1). Es claro que los operadores de Casimir de un grupo conmutan entre sí.

y de aquí sigue que

$$\left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = -i\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] = \hbar \hat{J}_z.$$

Con esto se han obtenido los conmutadores solicitados. Por otra parte, usando (XII.67) se obtiene

$$\begin{aligned}\hat{J}_+\hat{J}_- &= \tfrac{1}{2}\left(\hat{J}_x^2 - i\hat{J}_x\hat{J}_y + i\hat{J}_y\hat{J}_x + \hat{J}_y^2\right) \\ &= \tfrac{1}{2}\left\{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - i\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right]\right\} = \tfrac{1}{2}\left[\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z\left(\hat{J}_z - \hbar\right)\right].\end{aligned}$$

De manera similar,

$$\begin{aligned}\hat{J}_-\hat{J}_+ &= \tfrac{1}{2}\left\{\hat{J}_x^2 + i\hat{J}_x\hat{J}_y - i\hat{J}_y\hat{J}_x + \hat{J}_y^2\right\} \\ &= \tfrac{1}{2}\left\{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 + i\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right]\right\} = \tfrac{1}{2}\left[\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z\left(\hat{J}_z + \hbar\right)\right].\end{aligned}$$

Esta última expresión se pudo haber obtenido directamente combinando las ecuaciones (XII.62) y (XII.63).

Los operadores $\hat{J}_+$ y $\hat{J}_-$ actúan sobre un eigenestado de momento angular aumentando y reduciendo en la unidad, respectivamente, el valor de la proyección del momento angular sobre el eje Oz, como lo muestran las ecuaciones (T12.98) y (T12.99)

$$\hat{J}_+ |jm\rangle = \hbar C_{jm} |jm+1\rangle, \tag{XII.68}$$

$$\hat{J}_- |jm\rangle = \hbar C^*_{jm-1} |jm-1\rangle, \tag{XII.69}$$

donde los coeficientes C_{jm} son

$$C_{jm} = \sqrt{\tfrac{1}{2}(j+m+1)(j-m)}. \tag{XII.70}$$

Por esta razón se les conoce como operadores de ascenso y descenso, respectivamente.

XII.12 Demuestre que si un operador conmuta con $\hat{L}_x$ y $\hat{L}_y$, necesariamente conmuta con $\hat{\mathbf{L}}^2$.

Sea $\hat{A}$ un operador que conmuta con $\hat{L}_x$ y $\hat{L}_y$,

$$\left[\hat{A}, \hat{L}_x\right] = 0, \quad \left[\hat{A}, \hat{L}_y\right] = 0. \tag{XII.71}$$

Debido a esto podemos escribir

$$\left[\hat{A}, \hat{\mathbf{L}}^2\right] = \left[\hat{A}, \hat{L}_z^2\right] = \hat{L}_z\left[\hat{A}, \hat{L}_z\right] + \left[\hat{A}, \hat{L}_z\right]\hat{L}_z. \tag{XII.72}$$

Por otra parte, como

$$\hat{L}_z = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right],$$

tenemos que

$$\left[\hat{A}, \hat{L}_z\right] = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{A}, \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right]\right] = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{A}\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] - \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right]\hat{A}\right] = 0,$$

debido a las ecuaciones (XII.71). Combinando con (XII.72) sigue el resultado solicitado:

$$\left[\hat{A}, \hat{\mathbf{L}}^2\right] = 0. \tag{XII.73}$$

Como los resultados anteriores dependen sólo de las propiedades de conmutación de los operadores de momento angular, se pueden extender con la sustitución $\hat{L}_i \to \hat{J}_i$: si un operador conmuta con $\hat{J}_x$ y $\hat{J}_y$, necesariamente conmuta con $\hat{\mathbf{J}}^2$.

XII.13 Obtenga los elementos de matriz de $\hat{J}_x$ y $\hat{J}_y$ a partir de los operadores de ascenso y descenso $\hat{J}_+$ y $\hat{J}_-$.

Invirtiendo las ecuaciones (XII.67) se obtiene

$$\hat{J}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{J}_+ + \hat{J}_-\right), \tag{XII.74}$$

$$\hat{J}_y = -\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\hat{J}_+ - \hat{J}_-\right). \tag{XII.75}$$

Los elementos de matriz de los operadores de ascenso y descenso que pueden ser diferentes de cero están dados por las ecuaciones (T12.89) y (T12.90b), y se derivan directamente de (XII.68) y (XII.69); ellos son

$$\left\langle jm' \mid \hat{J}_+ \mid jm \right\rangle = \hbar C_{jm}\delta_{m',m+1}, \tag{XII.76}$$

$$\left\langle jm' \mid \hat{J}_- \mid jm \right\rangle = \hbar C^*_{jm-1}\delta_{m',m-1}. \tag{XII.77}$$

De estas expresiones, (XII.70) y (XII.74) sigue de inmediato que

$$\begin{aligned}\left\langle jm' \mid \hat{J}_x \mid jm \right\rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left(C_{jm}\delta_{m',m+1} + C^*_{jm-1}\delta_{m'+1,m}\right)\\ &= \frac{\hbar}{2}\Big[\sqrt{(j+m+1)\,(j-m)}\delta_{m',m+1}\\ &\quad + \sqrt{(j+m)\,(j-m+1)}\delta_{m'+1,m}\Big].\end{aligned} \tag{XII.78}$$

En otras palabras, los únicos elementos de matriz de $\hat{J}_x$ distintos de cero son

$$\left\langle j\ m\pm 1 \mid \hat{J}_x \mid jm \right\rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j\pm m+1)\,(j\mp m)}. \tag{XII.79}$$

De manera análoga se puede proceder con el operador $\hat{J}_y$:

$$\begin{aligned}\left\langle jm' \mid \hat{J}_y \mid jm \right\rangle &= -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}}\left(C_{jm}\delta_{m',m+1} - C^*_{jm-1}\delta_{m'+1,m}\right)\\ &= -\frac{i\hbar}{2}\Big[\sqrt{(j-m)\,(j+m+1)}\delta_{m',m+1}\\ &\quad - \sqrt{(j+m)\,(j-m+1)}\delta_{m'+1,m}\Big],\end{aligned} \tag{XII.80}$$

y los términos distintos de cero resultan

$$\left\langle j\ m\pm 1 \mid \hat{J}_y \mid jm \right\rangle = \mp\frac{i\hbar}{2}\sqrt{(j\pm m+1)\,(j\mp m)}. \tag{XII.81}$$

Las expresiones (XII.79) y (XII.81) muestran que todos los elementos de matriz no nulos de los operadores $\hat{J}_x$ y $\hat{J}_y$ se encuentran fuera de la diagonal principal.

XII.14 Obtenga detalladamente las matrices de Pauli.

Los elementos de matriz de interés están dados por las fórmulas del problema anterior con $j = 1/2$ y $m, m' = \pm 1/2$, a los que es necesario agregar los elementos de matriz no nulos de $\hat{J}_z$ (ecuación (T12.96)):

$$\left\langle \tfrac{1}{2}m' \mid \hat{J}_z \mid \tfrac{1}{2}m \right\rangle = \hbar m \delta_{mm'}. \tag{XII.82}$$

Utilizando la ecuación (XII.78) para $\mathbf{J} = \mathbf{S}$ (pues $\mathbf{L} = 0$) se obtiene

$$\begin{aligned} \left\langle \tfrac{1}{2}m' \mid \hat{S}_x \mid \tfrac{1}{2}m \right\rangle &= \frac{\hbar}{2}\left[\sqrt{\left(\tfrac{1}{2}+m+1\right)\left(\tfrac{1}{2}-m\right)}\delta_{m',m+1} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\left(\tfrac{1}{2}+m\right)\left(\tfrac{1}{2}-m+1\right)}\delta_{m'+1,m} \right]. \end{aligned} \tag{XII.83}$$

Las dos posibilidades $m, m' = \pm 1/2$ con $m - m' = \pm 1$ dan lugar a los siguientes elementos de matriz:[4]

$$\left\langle \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_x \left| \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2}, \tag{XII.84}$$

$$\left\langle \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_x \left| \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2}. \tag{XII.85}$$

Sobre la diagonal principal $m = m'$ y los elementos de matriz de $\hat{S}_x$ se anulan:

$$\left\langle \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_x \left| \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \right\rangle = 0, \tag{XII.86}$$

$$\left\langle \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_x \left| \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} \right\rangle = 0. \tag{XII.87}$$

La matriz $\hat{S}_x$ resulta así

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{XII.88}$$

De manera análoga se obtiene

$$\left\langle \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_y \left| \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \right\rangle = \left\langle \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_y \left| \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} \right\rangle = 0, \tag{XII.89}$$

$$\left\langle \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_y \left| \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \right\rangle = -\left\langle \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_y \left| \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} \right\rangle = i\frac{\hbar}{2}, \tag{XII.90}$$

es decir,

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \tag{XII.91}$$

Por último, la matriz $\hat{S}_z$ es diagonal,

$$\left\langle \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_z \left| \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \right\rangle = \tfrac{1}{2}\hbar, \tag{XII.92}$$

$$\left\langle \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_z \left| \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \right\rangle = \left\langle \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_z \left| \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} \right\rangle = 0, \tag{XII.93}$$

$$\left\langle \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_z \left| \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} \right\rangle = -\tfrac{1}{2}\hbar, \tag{XII.94}$$

con lo cual resulta

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{XII.95}$$

[4]Para evitar posibles confusiones, cuando sea conveniente se escribirá $|a, b\rangle$ en vez de $|a\, b\rangle$.

Las matrices de Pauli se definen omitiendo el factor $\hbar/2$ en $\hat{S}_i$, es decir,

$$\hat{\sigma}_i = \frac{2\hat{S}_i}{\hbar} \tag{XII.96}$$

y son, en consecuencia,

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{XII.97}$$

De esta definición sigue que el operador de espín para $S = 1/2$, se escribe en la forma

$$\hat{\mathbf{S}} = \tfrac{1}{2}\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \tag{XII.98}$$

donde $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)$.

De la definición (XII.97) sigue que las tres matrices de Pauli son hermitianas y de traza cero; además, su cuadrado es la unidad:

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \mathbb{I}. \tag{XII.99}$$

En la sección 8.4 del texto se construyen estas matrices a partir de primeros principios; sus propiedades de conmutación se estudian en los siguientes problemas.

XII.15 Demuestre que las matrices de Pauli anticonmutan y compruebe que esta propiedad se debe a que para el caso específico de espín $1/2$ se cumple $\hat{S}_\pm^2 = 0$.

El cálculo explícito permite comprobar que las matrices de Pauli tienen las siguientes propiedades:

$$\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i\hat{\sigma}_3, \qquad \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = -i\hat{\sigma}_3, \tag{XII.100}$$

$$\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -i\hat{\sigma}_2, \qquad \hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = i\hat{\sigma}_2, \tag{XII.101}$$

$$\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} = i\hat{\sigma}_1, \qquad \hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = -i\hat{\sigma}_1. \tag{XII.102}$$

De aquí sigue que las matrices de Pauli anticonmutan entre sí:

$$\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 + \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 = 0, \tag{XII.103}$$

$$\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_3 + \hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_1 = 0, \tag{XII.104}$$

$$\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3 + \hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_2 = 0. \tag{XII.105}$$

Las tres relaciones anteriores se pueden escribir en la forma abreviada

$$\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 0, \quad i \neq j, \tag{XII.106}$$

donde $\left\{\hat{A}, \hat{B}\right\} \equiv \left[\hat{A}, \hat{B}\right]_+ \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ es el anticonmutador de $\hat{A}$ y $\hat{B}$.

Para averiguar el origen de esta propiedad de anticonmutación, que es específica de las matrices de espín $1/2$, procedemos como sigue: De la definición del operador de ascenso para el espín

$$\hat{S}_+ = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{S}_x + i\hat{S}_y\right) \tag{XII.107}$$

sigue que

$$\hat{S}_+^2 = \tfrac{1}{2}\left[\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2 + i\left(\hat{S}_x\hat{S}_y + \hat{S}_y\hat{S}_x\right)\right]. \tag{XII.108}$$

Como de (XII.99) sigue que $\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2 = (\hbar^2/4)\,(\mathbb{I} - \mathbb{I}) = 0$, se obtiene

$$\hat{S}_+^2 = \frac{i}{2}\left\{\hat{S}_x, \hat{S}_y\right\}. \tag{XII.109}$$

Por otro lado, insertando los resultados del problema anterior en la ecuación (XII.107) se obtiene

$$\hat{S}_+ = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{XII.110}$$

de donde sigue que

$$\hat{S}_+^2 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{0}. \tag{XII.111}$$

Es posible obtener este mismo resultado sin recurrir a la forma explícita de la matriz $\hat{S}_+$, a partir de la acción de este operador sobre los estados $|+\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle$, $|-\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle$, como sigue. De las ecuaciones (T12.98)-(T12.99), o bien de (XII.76) y (XII.77), vemos que

$$\hat{S}_+\,|+\rangle = 0, \quad \hat{S}_+\,|-\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\,|+\rangle\,. \tag{XII.112}$$

La primera de estas ecuaciones dice que no hay estado de espín $1/2$ con proyección mayor que $1/2$; la segunda establece simplemente que si al estado $|-\rangle$ (con proyección de espín $-1/2$) se le aumenta la proyección del espín en la unidad, se obtiene el estado $|+\rangle$. De (XII.112) sigue que

$$\hat{S}_+^2\,|+\rangle = 0, \quad \hat{S}_+^2\,|-\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\hat{S}_+\,|+\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{S}_+^2 = 0. \tag{XII.113}$$

La conclusión $\hat{S}_+^2 = 0$ resulta del hecho de que para espín $1/2$ sólo hay dos estados independientes. Por otra parte, los dos primeros resultados en (XII.113) son practicamente obvios, tomando en cuenta que el operador $\hat{S}_+$ incrementa la proyección del espín en la unidad. Pero este argumento también muestra que la segunda igualdad sólo se cumple (hasta factores numéricos apropiados) para espín $1/2$. Introduciendo $\hat{S}_+^2 = 0$ en la ecuación (XII.109) sigue $\left\{\hat{S}_x, \hat{S}_y\right\} = 0$, que equivale a la ecuación (XII.103). Una relación similar vale para cualquier par de ejes, ya que todas las componentes de $\hat{\mathbf{S}}$ son dinámicamente equivalentes, por lo que las consideraciones anteriores equivalen a una rederivación de la ecuación (XII.106).

Se acostumbra escribir las ecuaciones (XII.99) y (XII.106) de manera condensada como una sola expresión en la forma

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j]_+ \equiv \{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\mathbb{I}\delta_{ij}. \tag{XII.114}$$

XII.16 Demuestre que las matrices de Pauli cumplen la siguiente condición, que les es específica:

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = \mathbb{I}\delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k.$$

Del problema XII.14 sabemos que

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{2}{\hbar}\hat{\mathbf{S}}. \tag{XII.115}$$

Como para $l = 0$ se tiene que $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{S}}$, las reglas de conmutación del espín son las usuales de momento angular, ecuación (T12.67); por lo tanto puede escribirse

$$\left[\hat{S}_i, \hat{S}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k. \tag{XII.116}$$

Combinando (XII.115) con (XII.116) se obtiene la regla de conmutación de las matrices de Pauli:

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j - \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = 2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k. \tag{XII.117}$$

Por otro lado, las matrices de Pauli anticonmutan, ecuación (XII.106)

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = 2\mathbb{I}\delta_{ij}. \tag{XII.118}$$

Sumando las dos últimas ecuaciones se obtiene una fórmula de gran utilidad en las aplicaciones:

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = \mathbb{I}\delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k. \tag{XII.119}$$

Como para obtener este resultado se usó la propiedad de anticonmutación (XII.118), que es específica para espín ½, también la ecuación (XII.119) es específica para este espín.

XII.17 Demuestre que las tres matrices de Pauli $\hat{\sigma}_i$ y la matriz unidad $\hat{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{I}$, forman una base completa para la representación de las matrices complejas de dimensión 2×2.

La ecuación (XII.119) muestra que el producto de cualquier par de matrices de Pauli, o da la matriz unidad (si los dos factores son iguales), o es proporcional a la tercera matriz de Pauli. Aplicando reiteradamente esta reducción, el producto de cualquier número de matrices de Pauli se puede expresar como la suma de términos proporcionales a la matriz unidad o a una de las matrices de Pauli. Por ejemplo, multiplicando (XII.119) por una matriz de Pauli $\hat{\sigma}_s$ se obtiene, simplificando con ayuda de la propia ecuación (XII.119),

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}_s\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j &= \delta_{ij}\hat{\sigma}_s + i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_s\hat{\sigma}_k \\
&= \delta_{ij}\hat{\sigma}_s + i\varepsilon_{ijk}\left(\mathbb{I}\delta_{sk} + i\varepsilon_{skl}\hat{\sigma}_l\right) \\
&= i\mathbb{I}\varepsilon_{ijs} + \delta_{ij}\hat{\sigma}_s - \left(\delta_{is}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{js}\right)\hat{\sigma}_l,
\end{aligned}$$

es decir,

$$\hat{\sigma}_s\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = i\mathbb{I}\varepsilon_{ijs} + \delta_{ij}\hat{\sigma}_s - \delta_{is}\hat{\sigma}_j + \delta_{js}\hat{\sigma}_i. \tag{XII.120}$$

Siguiendo este procedimiento, cualquier operador que se exprese en términos de las matrices de Pauli y pueda ser desarrollado en serie de potencias de ellas es reducible a la forma

$$\hat{O} = \sum_{A=0}^{3} C_A\hat{\sigma}_A = C_0\hat{\sigma}_0 + \boldsymbol{C}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \tag{XII.121}$$

donde las C_A son coeficientes numéricos. Como el operador $\hat{O}$ aquí considerado es una matriz 2×2 enteramente arbitraria, se ha demostrado que cualquier matriz

de dimensión 2×2 puede ser escrita como una combinación lineal de las cuatro matrices $\hat{\sigma}_A$, $A = 0, 1, 2, 3$. Estas cuatro matrices constituyen un álgebra en el espacio de Hilbert de dimensión 2.

Es ilustrativo recuperar el resultado anterior mediante el cálculo directo. Considérese la matriz general $\hat{O} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ de dimensión 2×2 con elementos complejos. Considérense asimismo cuatro números complejos C_A y las cuatro matrices $\hat{\sigma}_A$ que usamos para construir la matriz $\sum_A C_A \hat{\sigma}_A$, es decir, usando (XII.97),

$$\sum_A C_A \hat{\sigma}_A = \begin{pmatrix} C_0 + C_3 & C_1 - iC_2 \\ C_1 + iC_2 & C_0 - C_3 \end{pmatrix}. \tag{XII.122}$$

Cualquiera que sea la matriz $\hat{O}$ podemos escribirla en la forma (XII.122); basta para ello hacer la selección

$$a = C_0 + C_3, \qquad d = C_0 - C_3, \tag{XII.123}$$

$$b = C_1 - iC_2, \qquad c = C_1 + iC_2. \tag{XII.124}$$

Este sistema de ecuaciones tiene solución para todos los valores de los parámetros, por lo que, en efecto, la construcción es siempre posible.

Los coeficientes C_S en la ecuación (XII.121) se obtienen alternativamente multiplicándola sucesivamente por la matriz $\hat{\sigma}_S$, $S = 0, 1, 2, 3$, y tomando la traza. Recordando que $\operatorname{tr} \hat{\sigma}_i = 0$, pero $\operatorname{tr} \mathbb{I} = 2$, se obtiene

$$\operatorname{tr} \hat{O}\sigma_S = \sum_{A=0}^{3} C_A \operatorname{tr} \hat{\sigma}_A \hat{\sigma}_S = 2 \sum_{A=0}^{3} C_A \delta_{AS} = 2C_S,$$

$$C_S = \tfrac{1}{2} \operatorname{tr} \left(\hat{O} \hat{\sigma}_S \right), \quad S = 0, 1, 2, 3. \tag{XII.125}$$

XII.18 Demuestre que los operadores de proyección $\hat{P}_+$ y $\hat{P}_-$ construidos en el problema ilustrativo 10.3 del texto son ortogonales.

Los operadores $\hat{P}_+$ y $\hat{P}_-$ actúan en un espacio de Hilbert bidimensional y proyectan sobre los estados con $S_3 = \pm\hbar/2$, denotados aquí como $|+\rangle$ y $|-\rangle$. Estos operadores son

$$\hat{P}_\pm = \frac{1 \pm \hat{\sigma}_3}{2}. \tag{XII.126}$$

De esta definición sigue, por ejemplo,

$$\hat{P}_+ \hat{P}_- = \tfrac{1}{4} \left(\mathbb{I} + \hat{\sigma}_3 \right) \left(\mathbb{I} - \hat{\sigma}_3 \right) = \tfrac{1}{4} \left(\mathbb{I} - \hat{\sigma}_3^2 \right) = 0, \tag{XII.127}$$

por (XII.99) (o (XII.119)), resultado que muestra la ortogonalidad de estos operadores. De manera análoga se demuestra que $\hat{P}_- \hat{P}_+ = 0$ es igualmente cierto.

XII.19 Obtenga las matrices que representan a los operadores de momento angular para $j = 1$ y $j = {}^3\!/_2$.

Para $j = 1$ el número cuántico m puede tomar los valores $-1, 0, 1$. De (XII.79) y (XII.81) se obtiene

$$\left\langle 1, 1 \left| \hat{J}_x \right| 1, 1 \right\rangle = 0, \quad \left\langle 1, 1 \left| \hat{J}_x \right| 1, 0 \right\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}, \quad \left\langle 1, 1 \left| \hat{J}_x \right| 1, -1 \right\rangle = 0;$$

$$\left\langle 1,0\left|\hat{J}_x\right|1,1\right\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}},\quad \left\langle 1,0\left|\hat{J}_x\right|1,0\right\rangle = 0,\quad \left\langle 1,0\left|\hat{J}_x\right|1,-1\right\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}};$$
$$\left\langle 1,-1\left|\hat{J}_x\right|1,1\right\rangle = 0,\quad \left\langle 1,-1\left|\hat{J}_x\right|1,0\right\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}},\quad \left\langle 1,-1\left|\hat{J}_x\right|1,-1\right\rangle = 0.$$

La correspondiente matriz es

$$\hat{J}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{XII.128}$$

De forma análoga,

$$\left\langle 1,1\left|\hat{J}_y\right|1,1\right\rangle = 0,\quad \left\langle 1,1\left|\hat{J}_y\right|1,0\right\rangle = -i\frac{\hbar}{\sqrt{2}},\quad \left\langle 1,1\left|\hat{J}_y\right|1,-1\right\rangle = 0;$$
$$\left\langle 1,0\left|\hat{J}_y\right|1,1\right\rangle = i\frac{\hbar}{\sqrt{2}},\quad \left\langle 1,0\left|\hat{J}_y\right|1,0\right\rangle = 0,\quad \left\langle 1,0\left|\hat{J}_y\right|1,-1\right\rangle = -i\frac{\hbar}{\sqrt{2}};$$
$$\left\langle 1,-1\left|\hat{J}_y\right|1,1\right\rangle = 0,\quad \left\langle 1,-1\left|\hat{J}_y\right|1,0\right\rangle = i\frac{\hbar}{\sqrt{2}},\quad \left\langle 1,-1\left|\hat{J}_y\right|1,-1\right\rangle = 0.$$

$$\hat{J}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \tag{XII.129}$$

Finalmente, según (XII.82) la matriz $\hat{J}_z$ es diagonal, con eigenvalores $m\hbar$:

$$\left\langle 1,1\left|\hat{J}_z\right|1,1\right\rangle = \hbar,\quad \left\langle 1,1\left|\hat{J}_z\right|1,0\right\rangle = 0,\quad \left\langle 1,1\left|\hat{J}_z\right|1,-1\right\rangle = 0;$$
$$\left\langle 1,0\left|\hat{J}_z\right|1,1\right\rangle = 0,\quad \left\langle 1,0\left|\hat{J}_z\right|1,0\right\rangle = 0,\quad \left\langle 1,0\left|\hat{J}_z\right|1,-1\right\rangle = 0;$$
$$\left\langle 1,-1\left|\hat{J}_z\right|1,1\right\rangle = 0,\quad \left\langle 1,-1\left|\hat{J}_z\right|1,0\right\rangle = 0,\quad \left\langle 1,-1\left|\hat{J}_z\right|1,-1\right\rangle = -\hbar.$$

$$\hat{J}_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{XII.130}$$

Con ayuda de los resultados anteriores podemos escribir la matriz $\hat{J}_{\hat{\mathbf{n}}} = \hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{J}}$, que representa la componente de momento angular (o de espín) 1 en la dirección $\hat{\mathbf{n}} = (\operatorname{sen}\theta\cos\varphi, \operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}\varphi, \cos\theta)$, como

$$\hat{J}_{\hat{\mathbf{n}}} = \hbar\begin{pmatrix} \cos\theta & \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\theta e^{-i\varphi} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\theta e^{i\varphi} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\theta e^{-i\varphi} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}. \tag{XII.131}$$

Los correspondientes eigenvectores con eigenvalores $\hbar, 0, -\hbar$, respectivamente, son (véase ejercicio XII.56 al final del capítulo):

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\cos\theta)\,e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\theta \\ \frac{1}{2}(1-\cos\theta)\,e^{i\varphi} \end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\theta e^{-i\varphi} \\ \cos\theta \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\theta e^{i\varphi} \end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1-\cos\theta)\,e^{-i\varphi} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\theta \\ \frac{1}{2}(1+\cos\theta)\,e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \tag{XII.132}$$

Aprovechamos la forma explícita de los vectores (XII.132) para agregar algunos comentarios. Para $\theta = 0$, $\varphi = 0$ estos eigenvectores se reducen a

$$\mathbf{e}'_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}'_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}'_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{XII.133}$$

Estos vectores representan una base cartesiana posible para la descripción de los estados de momento angular 1; en esta base, el vector general tiene la forma

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} = \sum_i \mathbf{e}'_i \psi_i. \tag{XII.134}$$

Como se ha visto, en muchas aplicaciones es más conveniente el empleo de una base esférica para la descripción de los estados de momento angular (en la que $\hat{L}_z$ es diagonal). Esta base esférica está constituida por la tríada de vectores ortonormales

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= -\tfrac{1}{\sqrt{2}} \left(\mathbf{e}'_1 + i\mathbf{e}'_2 \right) = -\tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{e}_0 &= \mathbf{e}'_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{e}_{-1} &= \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left(\mathbf{e}'_1 - i\mathbf{e}'_2 \right) = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{XII.135}$$

Los vectores esféricos $\mathbf{e}_\alpha$, $\alpha = 1, 0, -1$, son vectores propios de $\hat{\mathbf{L}}^2$ (con eigenvalor 2) y de $\hat{L}_0 = \hat{L}_3$. Esto se ve claramente al compararlos con los armónicos esféricos $Y_1^m(\theta, \varphi)$, con $m = 1, 0, -1$, que podemos escribir en la forma

$$Y_1^m(\theta, \varphi) = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{r} \times \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{2}} (x + iy), & m = 1, \\ z, & m = 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (x - iy), & m = -1. \end{cases} \tag{XII.136}$$

Vemos que estos armónicos esféricos corresponden (hasta el factor $\sqrt{3/4\pi} r^{-1}$) a la representación esférica del vector $\mathbf{r} = \{x, y, z\} = \{x_1, x_0, x_{-1}\}$. La transición entre la representación cartesiana $\psi = \{\psi'_1, \psi'_2, \psi'_3\}$ y la esférica $\{\psi_1, \psi_0, \psi_{-1}\}$ se realiza mediante una matriz unitaria (véase el ejercicio XII.73):

$$\psi' = \hat{U}\psi, \quad \hat{U} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \tag{XII.137}$$

En el caso $j = 3/2$, m toma los valores $-3/2$, $-1/2$, $1/2$, $3/2$. Como sabemos, los elementos diagonales de $\hat{J}_x$ son todos nulos; para los elementos no diagonales se obtiene:

$$\left\langle \tfrac{3}{2}, \tfrac{3}{2} \left| \hat{J}_x \right| \tfrac{3}{2}, \tfrac{1}{2} \right\rangle = \left\langle \tfrac{3}{2}, \tfrac{1}{2} \left| \hat{J}_x \right| \tfrac{3}{2}, \tfrac{3}{2} \right\rangle = \tfrac{\sqrt{3}}{2} \hbar,$$

$$\left\langle \tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\left|\hat{J}_x\right|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle = \left\langle \tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\left|\hat{J}_x\right|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle = \hbar,$$
$$\left\langle \tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\left|\hat{J}_x\right|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\right\rangle = \left\langle \tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\left|\hat{J}_x\right|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle = 0,$$
$$\left\langle \tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\left|\hat{J}_x\right|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\right\rangle = \left\langle \tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\left|\hat{J}_x\right|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle = 0,$$
$$\left\langle \tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\left|\hat{J}_x\right|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\right\rangle = \left\langle \tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\left|\hat{J}_x\right|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle = \tfrac{\sqrt{3}}{2}\hbar,$$
$$\left\langle \tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\left|\hat{J}_x\right|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\right\rangle = \left\langle \tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\left|\hat{J}_x\right|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\right\rangle = 0.$$

Por lo tanto,

$$\hat{J}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}. \tag{XII.138}$$

De forma análoga se obtienen los elementos de matriz de $\hat{J}_y$; los no nulos son:

$$\left\langle \tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\left|\hat{J}_y\right|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle = -\left\langle \tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\left|\hat{J}_y\right|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\right\rangle = -i\tfrac{\sqrt{3}}{2}\hbar,$$
$$\left\langle \tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\left|\hat{J}_y\right|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle = -\left\langle \tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\left|\hat{J}_y\right|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle = -i\hbar,$$
$$\left\langle \tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\left|\hat{J}_y\right|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\right\rangle = -\left\langle \tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\left|\hat{J}_y\right|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle = -i\tfrac{\sqrt{3}}{2}\hbar.$$

Por lo tanto,

$$\hat{J}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{3} & 0 & 0 \\ i\sqrt{3} & 0 & -i2 & 0 \\ 0 & i2 & 0 & -i\sqrt{3} \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}. \tag{XII.139}$$

Por último, $\hat{J}_z$ es diagonal con el valor de m sobre la diagonal principal, lo que da

$$\hat{J}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}. \tag{XII.140}$$

XII.20 Si $\hat{\mathbf{n}}$ es un vector unitario constante con cosenos directores l, m, n respecto de los ejes x, y, z, demuestre que

$$\hat{\sigma}_{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{pmatrix} n & l-im \\ l+im & -n \end{pmatrix}, \quad (\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 = \mathbb{I}.$$

Confirme que los valores propios de $\hat{\sigma}_n$ son ± 1. ¿Qué significa esto?

Si $\hat{\mathbf{n}} = l\mathbf{i} + m\mathbf{j} + n\mathbf{k}$ es un vector unitario, se cumple que $l^2 + m^2 + n^2 = 1$. Como

$$\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} = l\hat{\sigma}_1 + m\hat{\sigma}_2 + n\hat{\sigma}_3, \tag{XII.141}$$

usando la forma explícita (XII.97) de las matrices de Pauli se obtiene, que en efecto,

$$\hat{\sigma}_{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{pmatrix} n & l-im \\ l+im & -n \end{pmatrix}. \tag{XII.142}$$

El resto del problema es inmediato de aquí, pues elevando al cuadrado se obtiene

$$(\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 = \begin{pmatrix} l^2+m^2+n^2 & 0 \\ 0 & l^2+m^2+n^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{XII.143}$$

Este resultado se puede obtener directamente con ayuda de la ecuación (XII.119):

$$(\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 = \sum_{i,j} n_i n_j \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \sum_{i,j} n_i n_j \left(\delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k\right) = \sum_i n_i^2 = 1. \tag{XII.144}$$

Si el estado del sistema se describe con el espinor (con la notación empleada en el problema XII.15)[5]

$$|\Psi\rangle = \psi_+(x)\,|+\rangle + \psi_-(x)\,|-\rangle = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}, \tag{XII.145}$$

el valor esperado de $\hat{\sigma}_n$ resulta

$$\begin{aligned} \langle\Psi|\,\hat{\sigma}_n\,|\Psi\rangle &= \begin{pmatrix} \psi_+^* & \psi_-^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n & l-im \\ l+im & -n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} \\ &= n\,|\psi_+|^2 - n\,|\psi_-|^2 + (l-im)\,\psi_+^*\psi_- + (l+im)\,\psi_-^*\psi_+. \end{aligned} \tag{XII.146}$$

Vemos que si cualquiera de las dos funciones de onda ψ_- o ψ_+ se anula, lo que correspondería a un estado de espín hacia arriba o hacia abajo, respectivamente, el valor esperado de $\hat{\sigma}_n$ es $\pm n$.

Los valores y vectores propios del operador $\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ se obtienen diagonalizándolo. Para ello usamos (XII.142) y escribimos la ecuación de valores propios

$$\begin{pmatrix} n & l-im \\ l+im & -n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \tag{XII.147}$$

de donde se obtiene el par de ecuaciones homogéneas

$$\begin{aligned} (n-\lambda)\,a + (l-im)\,b = 0, \\ (l+im)\,a - (n+\lambda)\,b = 0. \end{aligned} \tag{XII.148}$$

Existe una solución no trivial de este sistema sólo si su determinante se anula

$$\begin{vmatrix} n-\lambda & l-im \\ l+im & -n-\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - 1 = 0. \tag{XII.149}$$

Luego los eigenvalores del operador $\hat{\sigma}_n$ son $\lambda = \pm 1$. Los eigenvectores se determinan sustituyendo en (XII.148) el correspondiente eigenvalor y normalizando, lo que da

a) $\lambda = 1$:

$$|\varphi_1\rangle = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{l+im}{n+1} \end{pmatrix}; \tag{XII.150}$$

b) $\lambda = -1$:

$$|\varphi_2\rangle = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \begin{pmatrix} -\frac{l-im}{n+1} \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{XII.151}$$

[5] V. P. Vizgin en *Unified Field Theories in the first third of the 20th century* (Birkhäuser Verlag, Basel, 1994) afirma que, de acuerdo con van der Waerden, el término espinor fue introducido por Ehrenfest, quien fue uno de los primeros físicos en estudiar estos objetos.

En la representación usual en términos de los ángulos θ y φ de un sistema esférico de coordenadas, se tiene $l = \operatorname{sen}\theta\cos\varphi$, $m = \operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}\varphi$, $n = \cos\theta$, y la ecuación (XII.146) se convierte en

$$\langle\Psi|\,\hat{\sigma}_n\,|\Psi\rangle = \left(|\psi_+|^2 - |\psi_-|^2\right)\cos\theta + \left(\psi_+^*\psi_- e^{-i\varphi} + \psi_-^*\psi_+ e^{i\varphi}\right)\operatorname{sen}\theta. \quad \text{(XII.152)}$$

A su vez, (XII.150)-(XII.151) toman la forma

$$|\varphi_1\rangle = \sqrt{\frac{1+\cos\theta}{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\operatorname{sen}\theta}{1+\cos\theta}e^{i\varphi}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi}\operatorname{sen}(\theta/2)\end{pmatrix}, \quad \text{(XII.153)}$$

$$|\varphi_2\rangle = \sqrt{\frac{1+\cos\theta}{2}}\begin{pmatrix} -\frac{\operatorname{sen}\theta}{1+\cos\theta}e^{-i\varphi} \\ 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-e^{-i\varphi}\operatorname{sen}(\theta/2) \\ \cos(\theta/2)\end{pmatrix}. \quad \text{(XII.154)}$$

XII.21 Demuestre que las matrices $\hat{L}_x$ y $\hat{L}_y$ se pueden escribir en la forma dada en la ecuación (T12.102):

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & c_l & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ c_l & 0 & c_{l-1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & c_{l-1} & 0 & c_{l-2} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{l-2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & c_{-l+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & c_{-l+1} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -ic_l & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ ic_l & 0 & -ic_{l-1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & ic_{l-1} & 0 & -ic_{l-2} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ic_{l-2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -ic_{-l+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & ic_{-l+1} & 0 \end{pmatrix}.$$

En estas expresiones, $c_s = \sqrt{(l+s)\,(l-s+1)}$.

Estos resultados se derivan inmediatamente aplicando las fórmulas (XII.79) y (XII.81), las cuales especifican los elementos de matriz de los operadores $\hat{L}_x$ y $\hat{L}_y$ que pueden ser diferentes de cero. De estas leyes sigue que para tales elementos debe cumplirse que $m' = m \pm 1$, con los valores numéricos (proporcionales a C_{jm}) dados precisamente en el enunciado. Las ecuaciones (XII.138) y (XII.139) proporcionan ejemplos concretos de esta estructura. El interés del ejercicio reside en que ilustra la forma explícita general de estos operadores.

XII.22 Complete el argumento presentado en el texto, que permite concluir que sólo si se cumple la condición $\hat{\mathbf{L}} \mid \psi\rangle = 0$, es decir, si $\left\langle \hat{L}_x \right\rangle = \left\langle \hat{L}_y \right\rangle = \left\langle \hat{L}_z \right\rangle = 0$, las tres componentes del operador $\hat{\mathbf{L}}$ están bien definidas.

Las relaciones de conmutación del momento angular $\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar\hat{L}_k$, con i, j, k en orden cíclico, conducen, usando el procedimiento de la sección 8.6 del texto, a las desigualdades de Heisenberg

$$\Delta L_i \Delta L_j \geq \frac{\hbar}{2}\left|\left\langle \hat{L}_k \right\rangle\right|, \quad \text{(XII.155)}$$

donde, como de costumbre, $\Delta A = \left\langle \left(\Delta \hat{A}\right)^2 \right\rangle^{1/2}$ es la desviación cuadrática media de la variable descrita por $\hat{A}$ en el estado correspondiente. Si suponemos que cualesquiera dos componentes i, j del momento angular están bien definidas, de tal forma que se cumple $\Delta \hat{L}_i = 0$ y $\Delta \hat{L}_j = 0$ simultáneamente, resulta de (XII.155) que necesariamente para la tercera componente se cumple $\left\langle \hat{L}_k \right\rangle = 0$. Aplicando este argumento de manera sucesiva a las diferentes parejas de componentes se concluye que debe cumplirse $\left\langle \hat{L}_x \right\rangle = \left\langle \hat{L}_y \right\rangle = \left\langle \hat{L}_z \right\rangle = 0$, que equivale a $\hat{\mathbf{L}} \mid \psi\rangle = 0$.

Como para el momento angular finito se cumple $\Delta \hat{L}_s < \infty$, en realidad basta suponer que *una* de las componentes del momento angular está bien definida, de tal forma que $\Delta \hat{L}_i = 0$, digamos, para deducir de (XII.155) que para alguna $k \neq i$ se cumple $\left\langle \hat{L}_k \right\rangle = 0$. Repitiendo el procedimiento con las otras componentes se llega una vez más a la conclusión anterior.

XII.23 Demuestre la fórmula (T12.126).

Considere un sistema compuesto por dos subsistemas con vectores de estado $|j_1 m_1\rangle$ y $|j_2 m_2\rangle$, acoplados a momento angular total j con proyección sobre el eje Oz de valor m, de tal manera que el sistema completo queda descrito por el vector $|jm\rangle$. Este eigenvector del momento angular se puede escribir en este caso en la forma

$$|jm\rangle \equiv |j_1 j_2 jm\rangle = \sum_{m_1, m_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 | jm)\, |j_1 m_1\rangle\, |j_2 m_2\rangle\,, \tag{XII.156}$$

cuya inversa es (ecuación (T12.124))

$$|j_1 m_1\rangle\, |j_2 m_2\rangle = \sum_{j,m} (j_1 j_2 m_1 m_2 | jm)\, |j_1 j_2 jm\rangle\,. \tag{XII.157}$$

Los coeficientes de acoplamiento

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 | jm) = (\langle j_1\, m_1|\, \langle j_2\, m_2|)\, |j_1\ j_2\ j\, m\rangle = \langle j_1\, m_1|\, \langle j_2\, m_2 \mid j_1\ j_2\ j\, m\rangle \tag{XII.158}$$

son los coeficientes de Clebsch-Gordan para este sistema.

Como $\hat{J}_\pm = \hat{J}_{1\pm} + \hat{J}_{2\pm}$ y cada uno de estos últimos operadores actúa sobre su propio subespacio, podemos escribir, por ejemplo (ecuación (T12.125)),[6]

$$\begin{aligned}
\hat{J}_+ |jm\rangle &= \sum_{m_1, m_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 | jm)(\hat{J}_{1+} + \hat{J}_{2+})\, |j_1 m_1\rangle\, |j_2 m_2\rangle \\
&= \sum_{m_1, m_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 | jm) \left[\left(\hat{J}_{1+} |j_1 m_1\rangle \right) |j_2 m_2\rangle + |j_1 m_1\rangle \left(\hat{J}_{2+} |j_2 m_2\rangle \right) \right] \\
&= \hbar \sum_{m_1, m_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 | jm) \left[C_{j_1 m_1} |j_1 m_1 + 1\rangle\, |j_2 m_2\rangle \right. \\
&\quad \left. + C_{j_2 m_2} |j_1 m_1\rangle\, |j_2 m_2 + 1\rangle \right].
\end{aligned} \tag{XII.159}$$

[6] De manera explícita, el operador $\hat{J}_\pm$ es $\hat{J}_\pm = \hat{J}_{1\pm} \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \hat{J}_{2\pm}$, como se explica en la sección 10.2 del texto. Este punto se discute en el problema XII.31.

Como por otra parte

$$\hat{J}_+ \left| jm \right\rangle = \hbar C_{jm} \left| jm+1 \right\rangle , \tag{XII.160}$$

igualando ambas expresiones y tomando el producto escalar con $\langle j_1 m_1' | \langle j_2 m_2' |$, sigue que

$$\begin{aligned} C_{jm} \left\langle j_1 m_1' \right| \left\langle j_2 m_2' \right| \, jm+1 \rangle &= \sum_{m_1,m_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 | jm) \\ &\quad \times \left[C_{j_1 m_1} \left\langle j_1 m_1' \, | j_1 m_1 + 1 \right\rangle \left\langle j_2 m_2' \, | j_2 m_2 \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + C_{j_2 m_2} \left\langle j_1 m_1' \, | j_1 m_1 \right\rangle \left\langle j_2 m_2' \, | j_2 m_2 + 1 \right\rangle \right] \\ &= (j_1 j_2 m_1' - 1 m_2' | jm) C_{j_1 m_1' - 1} \\ &\quad + (j_1 j_2 m_1' m_2' - 1 | jm) C_{j_2 m_2' - 1} \\ &= C_{jm} \sum_{j'm'} (j_1 j_2 m_1' m_2' | j'm') \left\langle j_1 j_2 j'm' \, | jm+1 \right\rangle \\ &= C_{jm} (j_1 j_2 m_1' m_2' | jm+1). \end{aligned} \tag{XII.161}$$

En el penúltimo paso se utilizó la adjunta de la ecuación (XII.157). Finalmente, eliminando las primas que son ya innecesarias y usando (XII.70), se obtiene

$$\begin{aligned} \sqrt{(j+m+1)(j-m)} (j_1 j_2 m_1 m_2 | jm+1) = \\ = \sqrt{(j_1+m_1)(j_1-m_1+1)} (j_1 j_2 m_1 - 1 m_2 | jm) \\ + \sqrt{(j_2+m_2)(j_2-m_2+1)} (j_1 j_2 m_1 m_2 - 1 | jm). \end{aligned} \tag{XII.162}$$

En forma enteramente análoga se deriva la fórmula que sigue de aplicar el operador de descenso, con lo que se obtiene completa la ecuación (T12.126) solicitada.

XII.24 Demuestre la fórmula (T12.134)

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + 2\hat{J}_{1z}\hat{S}_z + 2\hat{J}_{1+}\hat{S}_- + 2\hat{J}_{1-}\hat{S}_+,$$

para el momento angular total que resulta de acoplar un momento angular $\hat{\mathbf{J}}_1$ y un momento espinorial $\hat{\mathbf{S}}$.

De $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{S}}$ sigue de inmediato que

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \left(\hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{S}} \right)^2 = \hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}. \tag{XII.163}$$

Utilizando las relaciones

$$\hat{S}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{S}_+ + \hat{S}_- \right), \quad \hat{S}_y = \frac{-i}{\sqrt{2}} \left(\hat{S}_+ - \hat{S}_- \right) \tag{XII.164}$$

y expresiones análogas para $\hat{J}_i$, se puede escribir

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} &= \tfrac{1}{2} \left(\hat{J}_+ + \hat{J}_- \right) \left(\hat{S}_+ + \hat{S}_- \right) - \tfrac{1}{2} \left(\hat{J}_+ - \hat{J}_- \right) \left(\hat{S}_+ - \hat{S}_- \right) + \hat{J}_z \hat{S}_z \\ &= \hat{J}_- \hat{S}_+ + \hat{J}_+ \hat{S}_- + \hat{J}_z \hat{S}_z. \end{aligned} \tag{XII.165}$$

Sustituyendo en la expresión (XII.163) (con $\mathbf{J} \to \mathbf{J}_1$) se obtiene el resultado solicitado:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + 2\hat{J}_{1z}\hat{S}_z + 2\hat{J}_{1+}\hat{S}_- + 2\hat{J}_{1-}\hat{S}_+. \tag{XII.166}$$

XII.25 Complete el cálculo de los coeficientes de acoplamiento para un momento angular j_1 y un espín $1/2$, que se dan en la tabla 12.1 del texto.

Si denotamos los coeficientes solicitados con a y b, el sistema de ecuaciones que los determina es el (T12.136), es decir,

$$(B - m_1)\, a - 2C_- C_{j_1 m_1} b = 0, \tag{XII.167}$$

$$-2C_- C_{j_1 m_1} a + (B + m_1 + 1)\, b = 0, \tag{XII.168}$$

donde $B = j\,(j+1) - j_1\,(j_1+1) - 3/4$, $C_- = C_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = 1/\sqrt{2}$. El momento angular resultante j puede tomar los valores $j_1 + 1/2$ y $j_1 - 1/2$; la proyección sobre el eje z puede tomar los valores $m_1 \pm 1/2$. Además, los coeficientes a, b deben cumplir la condición $|a|^2 + |b|^2 = 1$ para garantizar la normalización correcta del vector resultante.

a) Caso $j = j_1 + 1/2$. En este subespacio existen $2(j_1 + 1/2) + 1 = 2\,(j_1 + 1)$ vectores diferentes. Como $j(j+1) = j_1(j_1+1) + j_1 + 3/4$, y $B = j_1$, el sistema de ecuaciones se reduce a

$$(j_1 - m_1)a - \sqrt{2} C_{j_1 m_1} b = 0, \tag{XII.169}$$

$$-\sqrt{2} C_{j_1 m_1} a + (j_1 + m_1 + 1) b = 0. \tag{XII.170}$$

Introduciendo el valor de $C_{j_1 m_1}$ tomado de (XII.70) en la primera de estas ecuaciones se obtiene

$$\frac{a}{b} = \frac{\sqrt{2} C_{j_1 m_1}}{j_1 - m_1} = \sqrt{\frac{j_1 + m_1 + 1}{j_1 - m_1}}. \tag{XII.171}$$

Además, de la condición de normalización sigue (tomando a y b reales) que $(a/b)^2 + 1 = 1/b^2 = (2j_1 + 1)/(j_1 - m_1)$, por lo que se obtiene

$$a = \sqrt{\frac{j_1 + m_1 + 1}{2j_1 + 1}}, \quad b = \sqrt{\frac{j_1 - m_1}{2j_1 + 1}}. \tag{XII.172}$$

Para el término con $m_2 = 1/2$ se tiene $j_1 + m_1 + 1 = j_1 + m_1 + m_2 + 1/2 = j_1 + m + 1/2$; al término con $m_2 = -1/2$ corresponde una m_1' una unidad mayor que la anterior, pues $m = m_1' - 1/2 = m_1 + 1/2$, y se obtiene $j_1 - m_1 = j_1 - (m - 1/2) = j_1 - m + 1/2$. Tomando esto en cuenta, los coeficientes de acoplamiento se pueden reescribir en la forma

$$a = \sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}, \quad b = \sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}. \tag{XII.173}$$

b) Para el caso $j = j_1 - 1/2$ se tiene $j(j+1) = j_1(j_1+1) - j_1 - 1/4$ y resulta $B = -(j_1 + 1)$. Los $2j_1$ vectores diferentes se determinan procediendo como en el caso anterior. En este caso los papeles de a y b se intercambian, además de que se hace un cambio de signo en a:

$$a = -\sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}, \quad b = \sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}. \tag{XII.174}$$

Es fácil verificar que los vectores de los casos a) y b) que corresponden a la misma m son ortogonales, como es de esperarse.

XII.26 Calcule de manera directa los coeficientes de Clebsch-Gordan para el acoplamiento de los momentos angulares $1/2$ y 1. Compare sus resultados con la tabla T12.1.

El momento angular total puede valer $j = 3/2$, con posibles proyecciones $3/2$, $1/2$, $-1/2$, $-3/2$, o $j = 1/2$, con posibles proyecciones $1/2$, $-1/2$. En el primer caso se habla de un cuadruplete ($2 \times 3/2 + 1$ componentes), y en el segundo de un doblete ($2 \times 1/2 + 1$ componentes).

El estado $\left|\frac{3}{2}\ \frac{3}{2}\right\rangle$ se puede construir sólo con $m_1 = 1$, $m_2 = 1/2$, y la única posibilidad es (con $\left|\frac{1}{2}\ \pm\frac{1}{2}\right\rangle \equiv |\pm\rangle$ para el subsistema de espín $1/2$)

$$\left|\tfrac{3}{2}\ \tfrac{3}{2}\right\rangle = |1\ 1\rangle\,|+\rangle\,. \tag{XII.175}$$

El estado $\left|\frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle$ se puede obtener de $\left|\frac{3}{2}\ \frac{3}{2}\right\rangle$ aplicando una vez el operador de descenso $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$, de manera similar a como se procedió en el problema XII.23. Resulta

$$\begin{aligned}\hat{J}_-\left|\tfrac{3}{2}\ \tfrac{3}{2}\right\rangle &= \hbar C_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}\left|\tfrac{3}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle = \left(\hat{J}_{1-}\,|1\ 1\rangle\right)|+\rangle + |1\ 1\rangle\left(\hat{J}_{2-}\,|+\rangle\right)\\ &= \hbar\left(C_{10}\,|1\ 0\rangle\,|+\rangle + C_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\,|1\ 1\rangle\,|-\rangle\right),\end{aligned} \tag{XII.176}$$

es decir,

$$\left|\tfrac{3}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle = \frac{C_{10}}{C_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}}\,|1\ 0\rangle\,|+\rangle + \frac{C_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}}{C_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}}\,|1\ 1\rangle\,|-\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|1\ 0\rangle\,|+\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|1\ 1\rangle\,|-\rangle\,. \tag{XII.177}$$

Aplicamos el mismo procedimiento para obtener el estado $\left|\frac{3}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle$:

$$\begin{aligned}\hat{J}_-\left|\tfrac{3}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle &= \hbar C_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}\left|\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{2}\left|\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{1}{2}\right\rangle\\ &= \hbar\sqrt{\tfrac{2}{3}}\left(C_{1-1}\,|1\ -1\rangle\,|+\rangle + C_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\,|1\ 0\rangle\,|-\rangle\right)\\ &\quad + \hbar\sqrt{\tfrac{1}{3}}\left(C_{10}\,|1\ 0\rangle\,|-\rangle + 0\right)\\ &= \hbar\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|1\ -1\rangle\,|+\rangle + 2\hbar\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|1\ 0\rangle\,|-\rangle\,,\end{aligned} \tag{XII.178}$$

es decir,

$$\left|\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|1\ -1\rangle\,|+\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|1\ 0\rangle\,|-\rangle\,. \tag{XII.179}$$

Finalmente, el estado $\left|\frac{3}{2}\ -\frac{3}{2}\right\rangle$ puede ser sólo

$$\left|\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{3}{2}\right\rangle = |1\ -1\rangle\,|-\rangle\,. \tag{XII.180}$$

Con esto hemos determinado los cuatro estados que pertenecen al cuadruplete. Podemos verificar los resultados anteriores con la siguiente prueba de consistencia:

$$\begin{aligned}\hat{J}_-\left|\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{1}{2}\right\rangle &= \hbar C_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}\left|\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{3}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{\tfrac{3}{2}}\left|\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{3}{2}\right\rangle\\ &= \hbar\sqrt{\tfrac{1}{3}}\left(0 + C_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\,|1\ -1\rangle\,|-\rangle\right)\\ &\quad + \hbar\sqrt{\tfrac{2}{3}}\left(C_{1-1}\,|1\ -1\rangle\,|-\rangle + 0\right)\\ &= \hbar\left(\sqrt{\tfrac{1}{3}\cdot\tfrac{1}{2}} + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\right)|1\ -1\rangle\,|-\rangle\,,\end{aligned} \tag{XII.181}$$

es decir

$$\left|\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{3}{2}\right\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\left(\sqrt{\tfrac{1}{6}}+\sqrt{\tfrac{2}{3}}\right)|1\ -1\rangle\,|-\rangle = \left(\sqrt{\tfrac{1}{9}}+\sqrt{\tfrac{4}{9}}\right)|1\ -1\rangle\,|-\rangle\,,$$

que coincide con (XII.180).

Para construir los estados que corresponden al doblete con $j = 1/2$ partimos del hecho de que deben ser de la forma

$$\left|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle = a\,|1\ 1\rangle\,|-\rangle + b\,|1\ 0\rangle\,|+\rangle\,, \tag{XII.182}$$

$$\left|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\right\rangle = c\,|1\ 0\rangle\,|-\rangle + d\,|1\ -1\rangle\,|+\rangle\,. \tag{XII.183}$$

Además, los vectores $\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle$ y $\left|\frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle$ deben ser mutuamente ortogonales, condición que demanda que

$$\sqrt{\tfrac{2}{3}}b + \sqrt{\tfrac{1}{3}}a = 0. \tag{XII.184}$$

De esta condición y la de normalización sigue que $a = \sqrt{2/3}$, $b = -\sqrt{1/3}$, o sea

$$\left|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|1\ 1\rangle\,|-\rangle - \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|1\ 0\rangle\,|+\rangle\,. \tag{XII.185}$$

Finalmente, el vector restante $\left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle$ se obtiene del anterior por aplicación del operador de descenso, como se hizo arriba. Resulta

$$\left|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|1\ 0\rangle\,|-\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|1\ -1\rangle\,|+\rangle\,. \tag{XII.186}$$

Todos los coeficientes calculados en este problema se pueden obtener directamente aplicando la fórmula (XII.173). Por ejemplo, para el caso $j = 3/2$, $m = 1/2$ con $j_1 = 1$ esta fórmula da $a = \sqrt{2/3}$, $b = \sqrt{1/3}$, que son precisamente los coeficientes que aparecen en la ecuación (XII.177).

XII.27 Obtenga el determinante del sistema de ecuaciones (T12.136) y demuestre que es independiente de m_1, y que se anula si y sólo si $j = j_1 \pm 1/2$.

Con la notación $C_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = C_-$, el sistema de ecuaciones referido es

$$\begin{aligned}\left[j\,(j+1) - j_1\,(j_1+1) - \tfrac{3}{4} - m_1\right]a - 2C_-C_{j_1m_1}b = 0,\\ -2C_-C_{j_1m_1}a + \left[j\,(j+1) - j_1\,(j_1+1) - \tfrac{3}{4} + m_1 + 1\right]b = 0.\end{aligned} \tag{XII.187}$$

Con $B = j\,(j+1) - j_1\,(j_1+1) - 3/4$ como se puso en el problema XII.25, el determinante resulta (se usa la fórmula (XII.70))

$$\begin{aligned} D &= (B - m_1)\,(B + m_1 + 1) - 4C_-^2C_{j_1m_1}^2 \\ &= B(B+1) - m_1(m_1+1) - 4\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}(j_1 + m_1 + 1)(j_1 - m_1) \\ &= B(B+1) - j_1(j_1+1). \end{aligned} \tag{XII.188}$$

Como B no depende de m_1, de (XII.188) sigue que el determinante es independiente de este número cuántico. Insertando el valor de B se obtiene finalmente

$$D = \left[j(j+1) - j_1(j_1+1) - \tfrac{3}{4}\right]\left[j(j+1) - j_1(j_1+1) + \tfrac{1}{4}\right] - j_1(j_1+1). \tag{XII.189}$$

Por ejemplo, para $j = j_1 + 1/2$ se obtiene $j(j+1) - j_1(j_1+1) = j_1 + 3/4$ y de (XII.189) sigue que

$$D(+) = \left(j_1 + \tfrac{3}{4} - \tfrac{3}{4}\right)\left(j_1 + \tfrac{3}{4} + \tfrac{1}{4}\right) - j_1(j_1+1) = 0.$$

Una reducción similar ocurre para $j = j_1 - 1/2$. Es fácil comprobar que para cualquier otro valor de $j - j_1$, el determinante es diferente de cero.

XII.28 Extraiga de la tabla 12.1 del texto los coeficientes de Clebsch-Gordan para el acoplamiento de dos espines $1/2$ y construya las correspondientes funciones de estado del singulete y del triplete.

Para espines $1/2$ debemos tomar $m_1,\ m_2 = \pm 1/2$. Los dos espines se pueden acoplar a $j = 0$ (un solo estado o singulete con $m = 0$) y a $j = 1$ (tres diferentes estados o triplete, con $m = -1, 0, 1$). Para el singulete debemos tomar $j = j_1 - 1/2$, y de la tabla 12.1 del texto sigue que los coeficientes del acoplamiento son:

a) Para $m_2 = 1/2$: $-\left(\frac{1/2 - 0 + 1/2}{1+1}\right)^{1/2} = -\sqrt{1/2}$ (como $m = 0$, se debe tener $m_1 = -1/2$).

b) Para $m_2 = -1/2$: $\left(\frac{1/2 + 0 + 1/2}{1+1}\right)^{1/2} = +\sqrt{1/2}$ (como $m = 0$, se debe tener $m_1 = +1/2$).

De aquí sigue que el vector de estado del singulete generado con dos espines $1/2$ es

$$|00\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle\,|-\rangle - |-\rangle\,|+\rangle\right). \tag{XII.190}$$

En cada uno de los términos, el primer ket se refiere a la partícula 1, y el segundo a la 2.

Para el triplete tenemos $j = j_1 + 1/2$, y ocurren los tres casos siguientes:

a) $m = m_1 + m_2 = 1 \Rightarrow m_1 = m_2 = 1/2$, y de la tabla 12.1 del texto sigue un único coeficiente (de valor 1, obviamente); el vector de estado correspondiente es

$$|11\rangle = |+\rangle\,|+\rangle\,. \tag{XII.191}$$

b) $m = m_1 + m_2 = -1 \Rightarrow m_1 = m_2 = -1/2$, y de la tabla 12.1 del texto sigue un único coeficiente (de valor 1); el vector de estado correspondiente es

$$|1-1\rangle = |-\rangle\,|-\rangle\,. \tag{XII.192}$$

c) $m = m_1 + m_2 = 0 \Rightarrow m_1 = -m_2 = 1/2$, o bien $m_1 = -m_2 = -1/2$ y de la tabla 12.1 del texto siguen dos posibles coeficientes, que son $\left(\frac{1/2 - 0 + 1/2}{1+1}\right)^{1/2} = \sqrt{1/2}$; $\left(\frac{1/2 + 0 + 1/2}{1+1}\right)^{1/2} = \sqrt{1/2}$. El vector de estado correspondiente es

$$|10\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle\,|-\rangle + |-\rangle\,|+\rangle\right). \tag{XII.193}$$

Como era de esperarse, el vector de estado (XII.190) que corresponde al singulete resulta antisimétrico respecto al intercambio de las dos partículas constitutivas, mientras que los tres vectores de estado que corresponden al triplete (XII.191)-(XII.193) son simétricos frente a esta operación. El ejemplo muestra claramente la importancia que puede adquirir la fase relativa que distingue a los estados (XII.190) y (XII.193) entre sí (a diferencia de la fase global, que es arbitraria). Estados del tipo (XII.190) o (XII.193) son llamados *estados enredados* (*entangled* en inglés), pues el hecho de que no sean factorizables da lugar a fenómenos paradójicos, como el famoso *gato de Schrödinger*, o mejor, en su versión más actual y más estudiada, las *desigualdades de Bell* y las paradojas

asociadas a ellas. Los otros dos estados del triplete son factorizables (de hecho, están factorizados ya) y no dan lugar a problemas o efectos particulares.

Las tres componentes del triplete ($j = 1$) se mezclan entre sí ante una rotación como las componentes de un vector; sin embargo, el vector de estado del singulete no puede combinarse con ningún otro vector (pues no existe ninguno otro con $j = 0$) frente a tales rotaciones, por lo que se comporta como un escalar. Los cuatro vectores (tres del triplete y uno del singulete) constituyen una base ortonormal en el espacio producto de los subespacios de cada uno de los dos espines $1/2$. La separación de los cuatro estados resultantes en uno antisimétrico y tres simétricos corresponde a separar la base en estados con $j = 0$ y $j = 1$, respectivamente, y constituye una descomposición de los vectores en el espacio producto (de dimensión 4) construido a partir de los dos espacios (bidimensionales de espín $1/2$) en *representaciones irreducibles* del grupo de rotaciones. El origen de la irreducibilidad descansa en el hecho de que las rotaciones no mezclan componentes simétricas y antisimétricas, pues tal simetría es invariante frente a ellas. Esta descomposición en el espacio de Hilbert se describe esquemáticamente con la fórmula $2 \otimes 2 = 1 \oplus 3$.

La aplicación de la ecuación (XII.166) al presente caso da

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z} + 2\hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + 2\hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+}. \tag{XII.194}$$

De aquí sigue, por ejemplo,

$$\hat{\mathbf{S}}^2 \left|+\right\rangle \left|+\right\rangle = \left(\tfrac{3}{4}\hbar^2 + \tfrac{3}{4}\hbar^2\right) \left|+\right\rangle \left|+\right\rangle + 2\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \left|+\right\rangle \left|+\right\rangle = 2\hbar^2 \left|+\right\rangle \left|+\right\rangle. \tag{XII.195}$$

Continuando de esta manera se puede construir la matriz $\hat{\mathbf{S}}^2$, que en el espacio producto tensorial y en el orden $\left|++\right\rangle, \left|+-\right\rangle, \left|-+\right\rangle, \left|--\right\rangle$, resulta

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \tag{XII.196}$$

Esta matriz se descompone naturalmente en tres submatrices: dos unidimensionales (correspondientes a los eigenvalores $2\hbar^2$ y a los eigenvectores $\left|++\right\rangle$ y $\left|--\right\rangle$ en (XII.196)) y la submatriz $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ que representa a $\hat{\mathbf{S}}^2$ en el subespacio bidimensional generado por los vectores $\left|+-\right\rangle, \left|-+\right\rangle$; éste es el subespacio propio de $\hat{S}_z$ que corresponde a $m = 0$. Los vectores que diagonalizan esta matriz son precisamente los eigenvectores con $m = 0$ obtenidos previamente, (XII.190) y (XII.193). Esto lo podemos verificar a partir de las ecuaciones de eigenvalores

$$\hat{\mathbf{S}}^2 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda\hbar^2 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \tag{XII.197}$$

cuya ecuación característica es $(1 - \lambda)^2 - 1 = 0$, con raíces $\lambda = 0,\ 2$, es decir, $S = 0, 1$.

XII.29 Compruebe explícitamente que los estados (T12.138)-(T12.141) son ortogonales.

Se trata de los cuatro posibles estados construidos acoplando dos subsistemas con vectores de estado $|lm\rangle$ y $\left|\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\right\rangle \equiv |\pm\rangle$. Este mismo sistema se trata en el problema XII.25, en donde se usa j_1 en vez de l, y en el problema XII.28, para el caso particular $j_1 = 1/2$. Los estados de que se trata son los siguientes, con los coeficientes de Clebsch-Gordan obtenidos con ayuda de las fórmulas (XII.173) para $j = l + 1/2$ y (XII.174) para $j = l - 1/2$:

$$\left|l+\tfrac{1}{2},\ m+\tfrac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\,|l\ m\rangle\,|+\rangle + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\,|l\ m+1\rangle\,|-\rangle\,, \quad \text{(XII.198)}$$

$$\left|l+\tfrac{1}{2},\ m-\tfrac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}\,|l\ m-1\rangle\,|+\rangle + \sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}}\,|l\ m\rangle\,|-\rangle\,, \quad \text{(XII.199)}$$

$$\left|l-\tfrac{1}{2},\ m+\tfrac{1}{2}\right\rangle = -\sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\,|l\ m\rangle\,|+\rangle + \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\,|l\ m+1\rangle\,|-\rangle\,, \quad \text{(XII.200)}$$

$$\left|l-\tfrac{1}{2},\ m-\tfrac{1}{2}\right\rangle = -\sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}}\,|l\ m-1\rangle\,|+\rangle + \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}\,|l\ m\rangle\,|-\rangle\,. \quad \text{(XII.201)}$$

La ortogonalidad entre algunos de estos estados, como el primero y el segundo, es evidente de su estructura; para otros, como el primero y el tercero o el segundo y el cuarto, es consecuencia del intercambio de los coeficientes. Por ejemplo, tenemos

$$\left\langle l+\tfrac{1}{2},\ m-\tfrac{1}{2}\,\middle|\,l-\tfrac{1}{2},\ m-\tfrac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}\sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}}\,(-1+1) = 0. \quad \text{(XII.202)}$$

XII.30 Complete el argumento del texto para demostrar la relación del triángulo entre el momento angular total j y los dos momentos j_1 y j_2 que se acoplan para producirlo.

Este no es un problema elemental, por lo que una discusión detallada debe verse en los textos especializados.[7] Desde una perspectiva clásica, es claro que la suma de dos vectores $\mathbf{j}_1$ y $\mathbf{j}_2$ satisface la relación del triángulo, es decir, si j es la magnitud del vector $\mathbf{j}$ resultante, se cumple

$$|j_1 - j_2| \le j \le j_1 + j_2. \quad \text{(XII.203)}$$

En el caso cuántico la inevitable existencia de dispersión de las componentes del momento angular complica las cosas, pero es posible convencerse de que se aplica la regla (XII.203) con argumentos generales como los siguientes:

a) El límite superior $j \le j_1 + j_2$ sigue de considerar que el valor máximo de $m = m_1 + m_2$ es $j_1 + j_2$. Por lo tanto, tiene que existir la componente de momento angular $j = j_1 + j_2$. Pero no puede existir ninguna j mayor, pues ella daría lugar a componentes con m mayor que $m_1 + m_2$.

b) El límite inferior lo podemos verificar con varias observaciones. Por un lado, las relaciones de recurrencia de los coeficientes de Clebsch-Gordan del tipo (XII.162) permiten determinar el coeficiente $(j_1, j-j_1, j_1, j-j_1-1|jj-1)$

[7] Existen varios textos especializados en teoría de momento angular donde este tema se discute con amplitud; un texto clásico es E. U. Condon y G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra* (The University Press, Cambridge, 1935); puede verse asimismo A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton University Press, 1957). En Cohen-Tannoudji *et al.* (1977), capítulo X, volumen 2, se discute este tema con relativa profundidad, pero sin demandar demasiada especialización.

a partir de $(j_1, j-j_1, j_1, j-j_1|jj)$ (agregamos comas para mayor claridad); estos dos coeficientes determinan a su vez $(j_1, j-j_1, j_1-1, j-j_1|jj-1)$, etc. Si este proceso se continúa, pueden determinarse todos los coeficientes de acoplamiento para j, j_1, j_2 dados en términos de $(j_1, j_2, j_1, j-j_1|jj)$, coeficiente que a su vez se fija mediante la condición de normalización. El punto central está en que este último coeficiente es diferente de cero sólo para los valores del triplete j, j_1, j_2 que satisfacen la condición

$$j_1 - j_2 \leq j \leq j_1 + j_2. \tag{XII.204}$$

De manera análoga se pueden expresar los coeficientes de Clebsch-Gordan en términos de $(j_1, j_2, j-j_2, j_2|jj)$, proceso que conduce a la desigualdad

$$j_2 - j_1 \leq j \leq j_1 + j_2. \tag{XII.205}$$

De estas dos desigualdades sigue (XII.203) de inmediato.

Una manera un tanto más simple de alcanzar la misma conclusión consiste en considerar el momento angular orbital y sus eigenfunciones, los armónicos esféricos. Es posible verificar que los productos $Y_{l_1}^{m_1}(\Omega_1)Y_{l_2}^{m_2}(\Omega_2)$ pueden descomponerse en funciones propias del operador $\hat{\mathbf{L}}^2$ (con valores propios $\hbar^2 l(l+1)$, naturalmente) para las l's enteras que toman valores comprendidos por la regla del triángulo.

XII.31 Justifique la fórmula

$$\hat{J}_+ \mid j_1 m_1\rangle \mid j_2 m_2\rangle = \left(\hat{J}_{1+} \mid j_1 m_1\rangle\right) \mid j_2 m_2\rangle + \mid j_1 m_1\rangle \left(\hat{J}_{2+} \mid j_2 m_2\rangle\right),$$

donde $\hat{J}_+ = \hat{J}_{1+} + \hat{J}_{2+}$.

El operador $\hat{J}_+$ actúa en el espacio producto tensorial $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ de los espacios de Hilbert de los operadores $\hat{J}_1$ y $\hat{J}_2$, por lo que debe entenderse a estos últimos como expresados en términos de sus extensiones, $\hat{J}_+ = \hat{J}_{1+}\otimes\mathbb{I}_2 + \mathbb{I}_1\otimes\hat{J}_{2+}$, como se discute en la sección 10.2 del texto. Por lo tanto, podemos escribir

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ \mid 1\rangle\otimes \mid 2\rangle &= \left(\hat{J}_{1+}\otimes\mathbb{I}_2 + \mathbb{I}_1\otimes\hat{J}_{2+}\right) \mid 1\rangle\otimes \mid 2\rangle \\ &= \left(\hat{J}_{1+} \mid 1\rangle\right)\otimes \mid 2\rangle + \mid 1\rangle\otimes\left(\hat{J}_{2+} \mid 2\rangle\right). \end{aligned} \tag{XII.206}$$

Particularizando para la componente $\mid j_1 m_1\rangle \mid j_2 m_2\rangle$ del producto tensorial se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ \mid j_1 m_1\rangle \mid j_2 m_2\rangle &= \left(\hat{J}_{1+}\otimes\mathbb{I}_2 + \mathbb{I}_1\otimes\hat{J}_{2+}\right) \mid j_1 m_1\rangle \mid j_2 m_2\rangle \\ &= \left(\hat{J}_{1+} \mid j_1 m_1\rangle\right) \mid j_2 m_2\rangle + \mid j_1 m_1\rangle \left(\hat{J}_{2+} \mid j_2 m_2\rangle\right), \end{aligned} \tag{XII.207}$$

que es el resultado solicitado.

XII.32 El máximo momento angular radiado por unidad de tiempo por un dipolo clásico es $M = (4/3\omega c^3)\left\langle \ddot{\mathbf{d}}^2 \right\rangle_t$, donde $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$ es el momento dipolar. Muestre que

si este resultado se reinterpreta cuánticamente, en forma análoga a la usada en el capítulo 9 del texto con la energía radiada, resulta que $M = \hbar A$, donde A es el coeficiente A de Einstein apropiado. Esto se interpreta en la teoría cuántica como resultado de que cada fotón emitido posee (o porta) un momento angular (espín) de valor $\hbar$.

La expresión clásica para la razón de radiación de momento angular por una carga acelerada en la aproximación dipolar eléctrica es

$$M = \frac{4}{3c^3\omega}\overline{\ddot{\mathbf{d}}^2}. \tag{XII.208}$$

La reinterpretación cuántica de esta expresión permite escribir por analogía

$$M = \frac{4}{3c^3\omega}\left|\left\langle m\left|\ddot{\mathbf{d}}\right|n\right\rangle\right|^2 = \frac{4e^2\omega^3}{3c^3}\left|\langle m \mid \mathbf{r} \mid n\rangle\right|^2, \tag{XII.209}$$

para una transición entre los estados estacionarios n y m. Conviene reescribir este resultado en términos del coeficiente A de Einstein que da la probabilidad por unidad de tiempo de que ocurra una transición espontánea entre los estados n y m del sistema. Este coeficiente está dado por la ecuación (T9.98):

$$A_{nm} = \frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}\left|\langle m \mid \mathbf{r} \mid n\rangle\right|^2, \tag{XII.210}$$

donde ω representa la frecuencia de transición (con $E_n > E_m$),

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}. \tag{XII.211}$$

Comparando (XII.210) y (XII.209) vemos que, en efecto, se cumple

$$M = \hbar A_{nm}. \tag{XII.212}$$

Como el momento angular medio emitido en la unidad de tiempo es $\hbar A_{nm}$ y A_{nm} es la probabilidad de emisión de un fotón por unidad de tiempo, dicho fotón porta un momento angular $\hbar$. Usando (XII.211), esto lo podemos escribir como

$$\text{momento angular medio del fotón} = \frac{E_{\text{fotón}}}{\omega_{\text{fotón}}}. \tag{XII.213}$$

XII.2. Problemas adicionales

XII.33 En la descripción de sistemas que pueden emitir partículas de espín semientero aparecen operadores $\hat{U}$ que satisfacen las relaciones de conmutación (se toma $\hbar = 1$)

$$\left[\hat{U}, \hat{J}_z\right] = \tfrac{1}{2}\hat{U},$$
$$\left[\left[\hat{U}, \hat{\mathbf{J}}^2\right], \hat{\mathbf{J}}^2\right] = \tfrac{1}{2}\left[\hat{U}, \hat{\mathbf{J}}^2\right]_+ + \tfrac{3}{16}\hat{U},$$

donde $\hat{\mathbf{J}}$ representa el momento angular del sistema emisor. Determine los elementos de matriz no nulos del operador $\hat{U}$ en la base $|jm\rangle$.[8]

[8] J. A. Cronin, D. F. Greenberg, V. L. Telegdi, *University of Chicago Graduate Problems in Physics* (Addison-Wesley, Reading, 1967).

Del conmutador

$$\left[\hat{U}, \hat{J}_z\right] = \tfrac{1}{2}\hat{U} \tag{XII.214}$$

sigue que

$$\langle jm|\, \hat{U}\hat{J}_z - \hat{J}_z\hat{U}\, |j'm'\rangle = \left(m' - m\right) \langle jm|\, \hat{U}\, |j'm'\rangle = \tfrac{1}{2} \langle jm|\, \hat{U}\, |j'm'\rangle\,,$$

es decir,

$$\left(m' - m - \tfrac{1}{2}\right) \langle jm|\, \hat{U}\, |j'm'\rangle = 0. \tag{XII.215}$$

Luego, si $\langle jm|\, \hat{U}\, |j'm'\rangle \neq 0$ debe cumplirse que $m' = m + \frac{1}{2}$. A su vez, de

$$\left[\left[\hat{U}, \hat{\mathbf{J}}^2\right], \hat{\mathbf{J}}^2\right] = \tfrac{1}{2}\left[\hat{U}, \hat{\mathbf{J}}^2\right]_+ + \tfrac{3}{16}\hat{U} \tag{XII.216}$$

sigue que

$$\begin{aligned} \langle jm|\, \left[\left[\hat{U}, \hat{\mathbf{J}}^2\right], \hat{\mathbf{J}}^2\right] |j'm'\rangle &= \left(j'(j'+1) - j(j+1)\right) \langle jm|\, \left[\hat{U}, \hat{\mathbf{J}}^2\right] |j'm'\rangle \\ &= \left(j'(j'+1) - j(j+1)\right)^2 \langle jm|\, \hat{U}\, |j'm'\rangle \\ &= \left[\tfrac{1}{2}\left(j'(j'+1) + j(j+1)\right) + \tfrac{3}{16}\right] \langle jm|\, \hat{U}\, |j'm'\rangle\,, \end{aligned} \tag{XII.217}$$

por lo que es posible que $\langle jm|\, \hat{U}\, |j'm'\rangle \neq 0$ sólo si

$$\left(j'(j'+1) - j(j+1)\right)^2 = \tfrac{1}{2}\left(j'(j'+1) + j(j+1)\right) + \tfrac{3}{16}. \tag{XII.218}$$

Con $j'(j'+1) - j(j+1) = x$, las raíces de esta ecuación son $x_1 = j + {}^3\!/_4$ y $x_2 = -\left(j + {}^1\!/_4\right)$, que corresponden a $j' = j \pm {}^1\!/_2$, como se vio en el problema XII.25. Luego los elementos de matriz de $\hat{U}$ son diferentes de cero sólo para $j' = j \pm {}^1\!/_2$, $m' = m + {}^1\!/_2$, como es de esperarse para el intercambio de una partícula de espín ${}^1\!/_2$.

XII.34 Considere un sistema cuyo hamiltoniano $\hat{H}$ es invariante respecto al operador de rotaciones $\hat{R}\left(\hat{\mathbf{n}}, \theta\right)$. Demuestre que $\left[\hat{H}, \hat{J}_\alpha^k\right] = 0$, y que $\left[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}^2\right] = 0$, donde $\hat{J}_{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{n}}$, θ es el ángulo de rotación y el vector unitario $\hat{\mathbf{n}}$ especifica el eje de rotación.

La invariancia de $\hat{H}$ ante cualquier rotación significa que el hamiltoniano transformado por el operador $\hat{R}\left(\hat{\mathbf{n}}, \theta\right)$, $\hat{H}' \equiv \hat{R}^{-1}\hat{H}\hat{R} = e^{-i\hat{J}_\alpha\theta}\hat{H}e^{i\hat{J}_\alpha\theta}$, coincide con el hamiltoniano original. Esto se puede escribir en las formas alternativas (tomamos $\hbar = 1$)

$$e^{-i\hat{J}_\alpha\theta}\hat{H}e^{i\hat{J}_\alpha\theta} = \hat{H}, \tag{XII.219}$$

o bien

$$\hat{H}e^{i\hat{J}_\alpha\theta} - e^{i\hat{J}_\alpha\theta}\hat{H} = 0. \tag{XII.220}$$

Desarrollando los exponenciales en serie de Taylor, esta última expresión da

$$\hat{H}\left[1 + i\hat{J}_\alpha\theta + \left(i\hat{J}_\alpha\right)^2 \frac{\theta^2}{2!} + \cdots\right] - \left[1 + i\hat{J}_\alpha\theta + \left(i\hat{J}_\alpha\right)^2 \frac{\theta^2}{2!} + \cdots\right]\hat{H} = 0. \tag{XII.221}$$

Puesto que las potencias de θ son linealmente independientes, la igualdad se satisface sólo si el coeficiente de cada una de ellas se anula por separado; de (XII.221) vemos que esto ocurre sólo si se cumplen las igualdades

$$\left[\hat{H}, \hat{J}_\alpha\right] = 0, \quad \left[\hat{H}, \hat{J}_\alpha^2\right] = 0, \quad \ldots, \quad \left[\hat{H}, \hat{J}_\alpha^k\right] = 0. \tag{XII.222}$$

Dado que $\left[\hat{H}, \hat{J}_\alpha^2\right] = 0$ para todas las direcciones α, también es cierto que

$$\left[\hat{H}, \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2\right] = \left[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}^2\right] = 0. \tag{XII.223}$$

Las dos últimas ecuaciones son los resultados solicitados.

XII.35 En términos de operadores de ascenso y descenso asociados a ejes cartesianos, los operadores de momento angular se pueden expresar en la forma

$$\begin{aligned}
\hat{J}_1 &= \frac{\hbar}{2}\left(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2\right), \\
\hat{J}_2 &= \frac{i\hbar}{2}\left(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2\right), \\
\hat{J}_3 &= \frac{\hbar}{2}\left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2\right).
\end{aligned}$$

Demuestre que se satisfacen las relaciones de conmutación apropiadas, exprese los operadores $\hat{\mathbf{J}}^2$ y $\hat{J}_3$ en términos de los operadores de número y verifique que los estados

$$|JM\rangle = \frac{1}{\sqrt{(J+M)!\,(J-M)!}}\left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{J+M}\left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{J-M}|0\rangle\,, \quad |M| \leq J,$$

son propios de $\hat{\mathbf{J}}^2$ y $\hat{J}_3$, con valores propios $\hbar^2 J(J+1)$ y $\hbar M$, respectivamente.

Las relaciones de conmutación son inmediatas; por ejemplo, tomando en cuenta que los operadores con índice diferente conmutan entre sí, tenemos que

$$\begin{aligned}
\left[\hat{J}_1, \hat{J}_2\right] &= \frac{i\hbar^2}{4}\left[\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2\right] \\
&= \tfrac{1}{2} i\hbar^2\left[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1\right] \\
&= \frac{i\hbar^2}{2}\left[\hat{a}_1^\dagger\left(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + 1\right)\hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger\left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + 1\right)\hat{a}_2\right] \\
&= \frac{i\hbar^2}{2}\left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2\right) = i\hbar \hat{J}_3.
\end{aligned} \tag{XII.224}$$

Continuando con este proceso se verifica que se cumplen las relaciones de conmutación características del momento angular.

El operador $\hat{J}_3$ está ya expresado en términos de los operadores de número $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$,

$$\hat{J}_3 = \tfrac{1}{2}\hbar\left(\hat{n}_1 - \hat{n}_2\right). \tag{XII.225}$$

Para calcular $\hat{\mathbf{J}}^2$ combinamos primero las ecuaciones (XII.63) y (XII.64) para obtener la importante expresión

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_3^2 + \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+. \tag{XII.226}$$

En el presente caso tenemos

$$\hat{J}_+ = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2, \quad \hat{J}_- = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1, \tag{XII.227}$$

y (XII.226) equivale a

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 &= \frac{\hbar^2}{4}\left[(\hat{n}_1 - \hat{n}_2)^2 + 2\hat{n}_1(\hat{n}_2+1) + 2\hat{n}_2(\hat{n}_1+1)\right] \\ &= \frac{\hbar^2}{4}(\hat{n}_1+\hat{n}_2)(\hat{n}_1+\hat{n}_2+2). \end{aligned} \tag{XII.228}$$

Los estados (para $|M| \leq J$)

$$|JM\rangle = \frac{1}{\sqrt{(J+M)!\,(J-M)!}}\left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{J+M}\left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{J-M}|0\rangle \tag{XII.229}$$

se pueden escribir usando la ecuación (T11.44) en la forma

$$|JM\rangle = |N_1 N_2\rangle, \quad N_1 = J+M, \quad N_2 = J-M. \tag{XII.230}$$

De aquí y (XII.228) sigue de inmediato que

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2|JM\rangle &= \frac{\hbar^2}{4}(N_1+N_2)(N_1+N_2+2)|JM\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{4}(2J)(2J+2) = \hbar^2 J(J+1). \end{aligned} \tag{XII.231}$$

Finalmente, para el operador $\hat{J}_3 = \hbar(\hat{n}_1 - \hat{n}_2)/2$ se obtiene

$$\hat{J}_3|JM\rangle = \frac{\hbar}{2}(N_1 - N_2)|JM\rangle = \hbar M. \tag{XII.232}$$

XII.36 Un haz de partículas de espín 1 está totalmente polarizado en la dirección $\hat{\mathbf{n}} = (0, \frac{1}{\sqrt{5}}, \frac{2}{\sqrt{5}})$. Determine la probabilidad de que al medir S_3 se encuentre el valor 0, 1, -1.

El estado de las partículas corresponde al vector propio de $\hat{S}_n = \hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{S}}$ con valor propio 1. Procediendo de manera similar al problema XII.20, se encuentra que este eigenestado es[9]

$$|n\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix}\sqrt{5}\\ 2i\\ -i\end{pmatrix}, \tag{XII.233}$$

y que los estados propios de $\hat{S}_3$ son

$$|1\ 1\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\\ 0\end{pmatrix}, \quad |1\ 0\rangle = \begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}, \quad |1\ -1\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\\ 0\end{pmatrix}. \tag{XII.234}$$

La probabilidad de obtener $+1$ al medir S_3 es

$$P(1) = |\langle 1\ 1|\ n\rangle|^2 = \frac{1}{20}\left|\begin{pmatrix}1 & -i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{5}\\ 2i\\ -i\end{pmatrix}\right|^2 = \frac{9+4\sqrt{5}}{20} = 0.897\ldots. \tag{XII.235}$$

[9] Se sigue la discusión presentada en Galindo y Pascual (1989), p. 185.

Esta probabilidad relativamente alta es de esperarse, pues la componente mayor del vector $\hat{\mathbf{n}}$ está en la dirección positiva del eje Oz. De manera análoga se encuentra que $P(0) = 1/10$ y que $P(-1) = (9 - 4\sqrt{5})/20 = 0.003\ldots$

XII.37 El espinor más general que describe un espín $1/2$, tal que tenga la probabilidad $\cos^2\gamma$ de que su proyección sobre el eje Oz sea $\hbar/2$ (y $\operatorname{sen}^2\gamma$ de que sea $-\hbar/2$), es

$$\psi = \begin{pmatrix} e^{i\alpha}\cos\gamma \\ e^{i\beta}\operatorname{sen}\gamma \end{pmatrix}.$$

¿Cuál es la probabilidad de que el espín esté dirigido a lo largo de un eje arbitrario?

Consideremos una dirección arbitraria respecto del eje Oz original, definida por tres ángulos de Euler φ, χ, θ. El operador que describe esta rotación lo obtenemos de la ecuación (T9.73) y la forma explícita de las matrices de Pauli

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{i(\varphi+\chi)/2}\cos\frac{\theta}{2} & ie^{i(\varphi-\chi)/2}\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} \\ ie^{-i(\varphi-\chi)/2}\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} & e^{-i(\varphi+\chi)/2}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\alpha}\cos\gamma \\ e^{i\beta}\operatorname{sen}\gamma \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{i(\varphi+\chi)/2+i\alpha}\cos\frac{\theta}{2}\cos\gamma + ie^{i(\varphi-\chi)/2+i\beta}\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\operatorname{sen}\gamma \\ ie^{-i(\varphi-\chi)/2+i\alpha}\operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\cos\gamma + e^{-i(\varphi+\chi)/2+i\beta}\cos\frac{\theta}{2}\operatorname{sen}\gamma \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{XII.236}$$

Un caso particular de (XII.236), muy frecuente en la literatura, ocurre para $\alpha = \beta = \gamma = 0$, $\chi = 0$; se obtiene:

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \to \psi' = \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2}\cos\frac{\theta}{2} \\ ie^{-i\varphi/2}\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \tag{XII.237}$$

De (XII.236) sigue que la probabilidad de que el espín esté dirigido a lo largo de la dirección positiva del eje Oz' (que es arbitraria) es

$$\begin{aligned} P(+z') &= \left|\psi_1'\right|^2 \\ &= \cos^2\frac{\theta}{2}\cos^2\gamma + \operatorname{sen}^2\frac{\theta}{2}\operatorname{sen}^2\gamma + \tfrac{1}{2}\operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}2\gamma\operatorname{sen}(\chi+\alpha-\beta). \end{aligned} \tag{XII.238}$$

Un problema similar al que se acaba de resolver, que puede ser muy ilustrativo, consiste en determinar los valores propios del operador $\hat{S}$ asociado a la proyección del espín en la dirección definida por los ángulos esféricos θ, φ para partículas de espín $1/2$. El operador $\hat{S}$ está dado por

$$\begin{aligned} \hat{S} &= \frac{\hbar}{2}\left(\operatorname{sen}\theta\cos\varphi\hat{\sigma}_x + \operatorname{sen}\theta\,\operatorname{sen}\varphi\hat{\sigma}_y + \cos\theta\hat{\sigma}_z\right) \\ &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \operatorname{sen}\theta e^{-i\varphi} \\ \operatorname{sen}\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{XII.239}$$

Los vectores y valores propios de este operador están determinados por la ecuación

$$\hat{S}\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\lambda\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}. \tag{XII.240}$$

Sustituyendo (XII.239) en (XII.240) se obtiene la pareja de ecuaciones

$$(\cos\theta - \lambda)\,\chi_1 + \operatorname{sen}\theta e^{-i\varphi}\chi_2 = 0, \tag{XII.241}$$

$$\operatorname{sen}\theta e^{i\varphi}\chi_1 - (\cos\theta + \lambda)\,\chi_2 = 0. \tag{XII.242}$$

La resolvente de este sistema es $\lambda^2 - 1 = 0$, por lo que los dos valores propios buscados son $\pm\hbar/2$ ($\lambda = \pm$), y las correspondientes funciones propias normalizadas resultan (cf. (XII.153)-(XII.154))

$$\lambda = +1: \quad \chi_+ = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi}\,\mathrm{sen}\,\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \tag{XII.243}$$

$$\lambda = -1: \quad \chi_- = \begin{pmatrix} -\,\mathrm{sen}\,\frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \tag{XII.244}$$

Las funciones propias de $\hat{S}_x$, por ejemplo, se obtienen con $\theta = \pi/2$, $\varphi = 0$, y son:

$$\chi_{x+} = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \chi_{x-} = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{XII.245}$$

XII.38 Determine los valores y vectores propios del operador $\hat{S}_x + \hat{S}_y$ para un sistema de espín $1/2$. ¿Cuál es la probabilidad de que $\hat{S}_z$ tenga el valor $\hbar/2$ cuando el sistema se encuentra en el estado que corresponde al mayor de los valores propios anteriores?

Para $s = 1/2$ las matrices $\hat{S}_x$ y $\hat{S}_y$ tienen la forma dada en el problema XII.14. Usando esas expresiones, el operador $\hat{A} = \hat{S}_x + \hat{S}_y$ resulta

$$\hat{A} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix}. \tag{XII.246}$$

Los valores y vectores propios se obtienen diagonalizando el operador, para lo cual escribimos

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \tag{XII.247}$$

de donde sigue la pareja de ecuaciones homogéneas

$$-\lambda a + (1-i)\,b = 0, \quad (1+i)\,a - \lambda b = 0. \tag{XII.248}$$

Para que este sistema tenga una solución no trivial su determinante debe anularse, condición que da las soluciones $\lambda = \pm\sqrt{2}$. De aquí sigue que los valores propios del operador $\hat{A}$ son

$$A = \pm\frac{\hbar}{\sqrt{2}}. \tag{XII.249}$$

Sustituyendo éstos sucesivamente en (XII.248) se obtienen los correspondientes vectores propios, que una vez normalizados resultan:

a) Para $A_1 = \hbar/\sqrt{2}$,

$$|A_1\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1+i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}; \tag{XII.250}$$

b) para $A_2 = -\hbar/\sqrt{2}$,

$$|A_2\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{1+i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}. \tag{XII.251}$$

La probabilidad de que $\hat{S}_3$ tenga proyección de valor $\hbar/2$ cuando el sistema se encuentra en el estado $|A_1\rangle$ (que corresponde al mayor de los valores propios),

se determina escribiendo este vector en términos de los vectores propios de $\hat{S}_z = (\hbar/2)\hat{\sigma}_3$, que son, como sabemos,

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

De (XII.250) resulta de inmediato

$$|A_1\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle + \frac{1+i}{\sqrt{2}} |-\rangle \right) = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle + e^{i\pi/4} |-\rangle \right). \tag{XII.252}$$

Por lo tanto, la probabilidad de que $\hat{S}_z$ tenga el valor $+\hbar/2$ cuando el sistema se encuentra en el estado $|A_1\rangle$, es $1/2$. Un procedimiento alternativo consiste en calcular directamente de (XII.250) la probabilidad $|\langle + |A_1\rangle|^2 = 1/2$.

XII.39 Considere la función espinorial de un sistema compuesto por tres electrones. Utilice el operador de descenso $\hat{S}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-} + \hat{S}_{3-}$ para generar todos los vectores propios que corresponden a espín $3/2$ y $1/2$.

Para simplificar la notación escribimos los estados del sistema de tres espines como $|\alpha\rangle\,|\alpha\rangle\,|\alpha\rangle$, en vez de $|\alpha\rangle_1\,|\alpha\rangle_2\,|\alpha\rangle_3$, con $\alpha = \pm$ y tomamos $\hbar = 1$. Con

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_{1\pm} + \hat{S}_{2\pm} + \hat{S}_{3\pm}, \quad \hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z} + \hat{S}_{3z} \tag{XII.253}$$

sigue de (T12.77) o (XII.63) que podemos escribir

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = 2\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_z^2 - \hat{S}_z. \tag{XII.254}$$

El único estado con $S_z = 3/2$ es $|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle$, por lo que necesariamente

$$\left|\tfrac{3}{2}\ \tfrac{3}{2}\right\rangle = |+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle\,. \tag{XII.255}$$

De manera análoga se obtiene

$$\left|\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{3}{2}\right\rangle = |-\rangle\,|-\rangle\,|-\rangle\,. \tag{XII.256}$$

Si se desea, puede verificarse la identificación hecha en (XII.255) como sigue: De (XII.69) y (XII.253) aplicada a cada ket de espín $1/2$ sucesivamente, sigue que

$$\hat{S}_-\,|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|-\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle + |+\rangle\,|-\rangle\,|+\rangle + |+\rangle\,|+\rangle\,|-\rangle\right), \tag{XII.257}$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_+\hat{S}_-\,|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle &= \tfrac{1}{2}\left(|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle + |+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle + |+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle\right) \\ &= \tfrac{3}{2}\,|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle\,, \end{aligned} \tag{XII.258}$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_z\,|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle &= \tfrac{1}{2}\left(|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle + |+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle + |+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle\right) \\ &= \tfrac{3}{2}\,|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle\,. \end{aligned} \tag{XII.259}$$

Sustituyendo en (XII.254) se obtiene

$$\hat{\mathbf{S}}^2\,|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle = \left[2\tfrac{3}{2} + \left(\tfrac{3}{2}\right)^2 - \tfrac{3}{2}\right]|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle = \tfrac{3}{2}\left(\tfrac{3}{2}+1\right)|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle\,. \tag{XII.260}$$

Las dos últimas ecuaciones constatan la validez de la identificación (XII.255).

Para construir los estados restantes del multiplete seguimos el procedimiento utilizado en problemas como el XII.23 o XII.26. Partimos de

$$\hat{S}_- \left|\tfrac{3}{2}\ \tfrac{3}{2}\right\rangle = \sqrt{\tfrac{3}{2}}\left|\tfrac{3}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|-\rangle|+\rangle|+\rangle + |+\rangle|-\rangle|+\rangle + |+\rangle|+\rangle|-\rangle\right),$$

es decir,

$$\left|\tfrac{3}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left(|-\rangle|+\rangle|+\rangle + |+\rangle|-\rangle|+\rangle + |+\rangle|+\rangle|-\rangle\right). \tag{XII.261}$$

Repitiendo el procedimiento se obtiene

$$\left|\tfrac{3}{2}\ -\tfrac{1}{2}\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left(|-\rangle|-\rangle|+\rangle + |-\rangle|+\rangle|-\rangle + |+\rangle|-\rangle|-\rangle\right). \tag{XII.262}$$

Una nueva aplicación de $\hat{S}_-$ conduce a la ecuación (XII.256), como es de esperarse.

Para obtener los vectores que corresponden a espín $1/2$ introducimos el operador de proyección

$$\hat{O}_{1/2} = \hat{\mathbf{S}}^2 - \tfrac{3}{2}\left(\tfrac{3}{2}+1\right), \tag{XII.263}$$

que obviamente cancela las componentes de espín $3/2$ al actuar sobre eigenestados de momento angular (véase ejercicio XII.63), y consideramos un vector que contenga al estado $\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle$; específicamente, tomamos $|-\rangle|+\rangle|+\rangle$, pero esto no es fundamental. Tenemos

$$\begin{aligned}
\hat{S}_-|-\rangle|+\rangle|+\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|-\rangle|-\rangle|+\rangle + |-\rangle|+\rangle|-\rangle\right), && \text{(XII.264)}\\
\hat{S}_+\hat{S}_-|-\rangle|+\rangle|+\rangle &= \tfrac{1}{2}\left(|+\rangle|-\rangle|+\rangle + 2|-\rangle|+\rangle|+\rangle + |+\rangle|+\rangle|-\rangle\right), && \text{(XII.265)}\\
\hat{S}_z|-\rangle|+\rangle|+\rangle &= \tfrac{1}{2}\left(-|-\rangle|+\rangle|+\rangle + |-\rangle|+\rangle|+\rangle + |-\rangle|+\rangle|+\rangle\right)\\
&= \tfrac{1}{2}|-\rangle|+\rangle|+\rangle. && \text{(XII.266)}
\end{aligned}$$

Con estos resultados se obtiene, usando (XII.263) y (XII.254),

$$\begin{aligned}
\hat{O}_{1/2}|-\rangle|+\rangle|+\rangle &= \left(2\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_z^2 - \hat{S}_z - \tfrac{15}{4}\right)|-\rangle|+\rangle|+\rangle\\
&= |+\rangle|-\rangle|+\rangle + 2|-\rangle|+\rangle|+\rangle + |+\rangle|+\rangle|-\rangle\\
&\quad + \left(\tfrac{1}{4} - \tfrac{1}{2} - \tfrac{15}{4}\right)|-\rangle|+\rangle|+\rangle\\
&= |+\rangle|-\rangle|+\rangle - 2|-\rangle|+\rangle|+\rangle + |+\rangle|+\rangle|-\rangle. && \text{(XII.267)}
\end{aligned}$$

De aquí sigue que

$$\left|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle_1 = \tfrac{1}{\sqrt{6}}\left(|+\rangle|-\rangle|+\rangle - 2|-\rangle|+\rangle|+\rangle + |+\rangle|+\rangle|-\rangle\right). \tag{XII.268}$$

El coeficiente global se determinó de la normalización. El vector $\left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle$ se construye de aquí usando el procedimiento ya conocido; se obtiene

$$\left|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\right\rangle_1 = \tfrac{1}{\sqrt{6}}\left(-|-\rangle|-\rangle|+\rangle + 2|+\rangle|-\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle|-\rangle\right). \tag{XII.269}$$

Los anteriores no son todos los vectores propios de espín $1/2$ de un sistema de tres espines $1/2$, pues el número total de vectores propios es $(2\,1/2+1)^3 = 8$; los dos vectores faltantes tienen que estar asociados a espín total $1/2$, pues el cuadruplete de espín $3/2$ ya se determinó de manera completa. Para construir los vectores

faltantes $\left|\frac{1}{2}\ \pm\frac{1}{2}\right\rangle_2$ tomamos en cuenta que $\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle_2$ debe ser simultáneamente ortogonal a $\left|\frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle$ y a $\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle_1$. Como su forma general es

$$\left|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle_2 = a\,|+\rangle\,|-\rangle\,|+\rangle + b\,|-\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle + c\,|+\rangle\,|+\rangle\,|-\rangle\,, \tag{XII.270}$$

debe cumplirse que

$$\left\langle\tfrac{3}{2}\ \tfrac{1}{2}\right|\left.\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle_2 = a + b + c = 0, \tag{XII.271}$$

$$_1\left\langle\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right|\left.\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle_2 = a - 2b + c = 0. \tag{XII.272}$$

De aquí y de la normalización sigue que

$$\left|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle_2 = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle\,|-\rangle\,|+\rangle - |+\rangle\,|+\rangle\,|-\rangle\right). \tag{XII.273}$$

Finalmente, aplicando una vez más el operador de descenso se obtiene el estado faltante:

$$\left|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\right\rangle_2 = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|-\rangle\,|-\rangle\,|+\rangle - |-\rangle\,|+\rangle\,|-\rangle\right). \tag{XII.274}$$

No es difícil entender el origen de la existencia de varios multipletes para valores intermedios del momento angular, como resultado de las diversas posibilidades que se dan en el acoplamiento de los momentos angulares para producir un cierto estado compuesto. Por ejemplo, el estado $\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle$ lo podemos obtener de diversas maneras. Una consiste en acoplar primero dos de los espines $1/2$ a 1, para acoplar a continuación el tercero a este espín 1, para obtener momento angular total $1/2$ (en acoplamiento del tipo $j = j_1 - 1/2$); este procedimiento da

$$\left|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle = a_1\,|1\ 0\rangle\,|+\rangle + b_1\,|1\ 1\rangle\,|-\rangle\,. \tag{XII.275}$$

(Los coeficientes se discuten más abajo.) Una segunda posibilidad consiste en obtener $\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle$ acoplando primero dos espines a momento angular 0, para con el tercero obtener momento angular total $1/2$ (esquema $j = j_1 + 1/2$). Este procedimiento da, por ejemplo,

$$\left|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle = |+\rangle\,|0\ 0\rangle\,. \tag{XII.276}$$

El ket $|0\ 0\rangle$ generado con el acoplamiento de dos espines $1/2$ está dado por la ecuación (T12.133) o (XII.190),

$$|0\ 0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle\,|-\rangle - |-\rangle\,|+\rangle\right); \tag{XII.277}$$

sustituyendo esta expresión en (XII.276) se obtiene

$$\left|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,|+\rangle\left(|+\rangle\,|-\rangle - |-\rangle\,|+\rangle\right), \tag{XII.278}$$

que es precisamente la ecuación (XII.273). Por otro lado, tenemos también que (cf. ecuaciones (T12.130) y (T12.127) o (XII.191), (XII.193))

$$|1\ 0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle\,|-\rangle + |-\rangle\,|+\rangle\right), \quad |1\ 1\rangle = |+\rangle\,|+\rangle\,; \tag{XII.279}$$

los coeficientes a_1, b_1 de (XII.275) se determinaron en los problemas XII.25 y XII.26 (y se listan en la tabla 12.1 del texto). Usando estos coeficientes y combinando con las dos últimas expresiones se obtiene (multiplicamos por un factor global -1, debido a la selección específica de las etiquetas):

$$\begin{aligned}\left|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{3}}\,|1\ 0\rangle\,|+\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|1\ 1\rangle\,|-\rangle \\ &= \tfrac{1}{\sqrt{6}}\left(|+\rangle\,|-\rangle + |-\rangle\,|+\rangle\right)|+\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|+\rangle\,|+\rangle\,|-\rangle\,,\end{aligned} \tag{XII.280}$$

que es equivalente a (XII.268). No queda ninguna otra posibilidad compatible con las reglas de la mecánica cuántica, por lo que la descripción del sistema está ya completa.

De la discusión se concluye que el acoplamiento de tres espines $1/2$ produce un cuadruplete de espín $3/2$ y dos dobletes de espín $1/2$. Esta descomposición del espacio producto de Hilbert en representaciones irreducibles del grupo de rotaciones (es decir, en *multipletes* del grupo de rotaciones) se expresa en la forma $2 \otimes 2 \otimes 2 = 4 \oplus 2 \oplus 2$. Vista esta descomposición desde la perspectiva que da el resultado obtenido en el problema XII.28, es decir, tomando en cuenta que $2 \otimes 2 = 3 \oplus 1$, se encuentra que se puede escribir alternativamente $2 \otimes 2 \otimes 2 = 2 \otimes (3 \oplus 1) = 2 \otimes 3 \oplus 2 = 4 \oplus 2 \oplus 2$. De aquí sigue que $2 \otimes 3 = 4 \oplus 2$. En palabras, esta fórmula establece que el acoplamiento de tres espines $1/2$ genera un cuadruplete y dos dobletes. Como acabamos de ver, un primer doblete aparece como resultado del acoplamiento de un espín $1/2$ (doblete) y un espín 1 (triplete), que genera los momentos angulares $3/2$ (cuadruplete) y $1/2$ (doblete). El segundo doblete proviene del acoplamiento $2 \otimes 1 = 2$ de un doblete y un singulete de espín cero.

XII.40 Considere un sistema cuántico con espacio de Hilbert bidimensional y hamiltoniano

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 + \varepsilon_a & \varepsilon_b^* \\ \varepsilon_b & E_0 - \varepsilon_a \end{pmatrix}.$$

En el tiempo $t = 0$ el sistema se encuentra en el estado $|+\rangle$. ¿Cuál es la amplitud de la probabilidad de cada uno de los estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$ en el tiempo t?

Escribiendo $\varepsilon_a = \varepsilon_3$, $\varepsilon_b = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$, y utilizando estos valores para construir un vector $\varepsilon = (\{\varepsilon_i\})$ con dirección $\hat{\mathbf{n}} = \boldsymbol{\varepsilon}/\varepsilon$, $\varepsilon = |\varepsilon|$, el hamiltoniano toma la forma

$$\hat{H} = E_0 \mathbb{I} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = E_0 \hat{\sigma}_0 + \varepsilon \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \tag{XII.281}$$

El operador de evolución, dado por la ecuación (T9.39), es

$$\hat{S}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} = e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-i\varepsilon t \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\sigma}/\hbar}. \tag{XII.282}$$

Conviene reescribir este operador usando una generalización al espacio de Hilbert bidimensional de la fórmula de Euler, la que se obtiene como sigue: Un desarrollo en serie de potencias da

$$\begin{aligned} e^{i\alpha \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}} &= \sum_{k=0}^{\infty} i^k \frac{\alpha^k}{k!} \hat{\sigma}_n^k \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\alpha^{2k}}{(2k)!} \hat{\sigma}_n^{2k} + i \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\alpha^{2k+1}}{(2k+1)!} \hat{\sigma}_n^{2k+1\prime}, \end{aligned} \tag{XII.283}$$

donde se puso $\hat{\sigma}_n = \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$. Con $\hat{\mathbf{n}} = (\{n_i\})$, $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1$, resulta

$$\hat{\sigma}_n^2 = \sum_{ij} n_i n_j \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \sum_i n_i^2 \hat{\sigma}_i^2 = \sum_i n_i^2 \mathbb{I} = \mathbb{I}, \tag{XII.284}$$

pues $\sum_{ij} n_i n_j \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j$ para $i \neq j$ da 0, ya que el producto $n_i n_j$ es simétrico respecto al intercambio de los índices, mientras que el factor $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j$ es antisimétrico (véase el

problema XII.20). Luego, en la primera suma que aparece en la ecuación (XII.283) todos los operadores se reducen a la unidad, $\hat{\sigma}_n^{2k} = \left(\hat{\sigma}_n^2\right)^k = \mathbb{I}$, mientras que para las potencias impares queda $\hat{\sigma}_n^{2k+1} = \hat{\sigma}_n \hat{\sigma}_n^{2k} = \hat{\sigma}_n$. De esta manera (XII.283) conduce a la generalización buscada:

$$e^{i\alpha \hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\alpha^{2k}}{(2k)!} + i\hat{\sigma}_n \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\alpha^{2k+1}}{(2k+1)!},$$

es decir,

$$e^{i\alpha \hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = \mathbb{I}\cos\alpha + i\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\ \mathrm{sen}\,\alpha. \tag{XII.285}$$

Aplicando esta útil fórmula a la ecuación (XII.282) con $\alpha = -\varepsilon t/\hbar$, se obtiene para el operador de evolución

$$\hat{S}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} = e^{-iE_0 t/\hbar}\left(\cos\frac{\varepsilon t}{\hbar} - i\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\,\mathrm{sen}\,\frac{\varepsilon t}{\hbar}\right). \tag{XII.286}$$

Utilizaremos el resultado anterior para obtener la amplitud solicitada. En el tiempo t el estado del sistema es

$$\begin{aligned}
|t\rangle &= \hat{S}(t)\,|+\rangle = e^{-iE_0 t/\hbar}\left(\mathbb{I}\cos\frac{\varepsilon t}{\hbar} - i\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\,\mathrm{sen}\,\frac{\varepsilon t}{\hbar}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \\
&= e^{-iE_0 t/\hbar}\begin{pmatrix} \cos\frac{\varepsilon t}{\hbar} - in_3\,\mathrm{sen}\,\frac{\varepsilon t}{\hbar} & -i\,(n_1 - in_2)\,\mathrm{sen}\,\frac{\varepsilon t}{\hbar} \\ -i\,(n_1 + in_2)\,\mathrm{sen}\,\frac{\varepsilon t}{\hbar} & \cos\frac{\varepsilon t}{\hbar} + in_3\,\mathrm{sen}\,\frac{\varepsilon t}{\hbar}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \\
&= e^{-iE_0 t/\hbar}\left[\left(\cos\frac{\varepsilon t}{\hbar} - i\frac{\varepsilon_3}{\varepsilon}\,\mathrm{sen}\,\frac{\varepsilon t}{\hbar}\right)|+\rangle - i\frac{\varepsilon_1 + i\varepsilon_2}{\varepsilon}\,\mathrm{sen}\,\frac{\varepsilon t}{\hbar}\,|-\rangle\right]. \\
&\equiv A_+(t)\,|+\rangle + A_-(t)\,|-\rangle\,.
\end{aligned} \tag{XII.287}$$

La amplitud del estado $|+\rangle$ en el tiempo t es $A_+(t)$, y la del estado $|-\rangle$ es $A_-(t)$. La probabilidad de que el sistema esté en el estado inicial $|+\rangle$ o en el estado opuesto al tiempo t es, respectivamente,

$$P_+(t) = |A_+(t)|^2 = \cos^2\frac{\varepsilon t}{\hbar} + \frac{\varepsilon_3^2}{\varepsilon^2}\,\mathrm{sen}^2\,\frac{\varepsilon t}{\hbar}, \tag{XII.288}$$

$$P_-(t) = 1 - P_+(t) = \frac{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2}{\varepsilon^2}\,\mathrm{sen}^2\,\frac{\varepsilon t}{\hbar}. \tag{XII.289}$$

El sistema está alternando periódicamente entre ambos estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$, con frecuencia $\varepsilon/\hbar$, pero la mayor parte del tiempo su estado es una superposición de ellos.

XII.41 Los niveles de energía de electrones en un campo magnético uniforme y constante, de intensidad B, son $-\mu_B B$ y $+\mu_B B$, y les corresponden los estados propios $|+\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ y $|-\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$, respectivamente. Si en el $t = 0$ el sistema se encuentra en el estado $\frac{1}{13}\begin{pmatrix}5i\\12\end{pmatrix}$, ¿cuál es el valor medio de $\hat{S}_x$ en el tiempo $t > 0$?

Denotemos con $E_+ = -\mu_B B$ y $E_- = \mu_B B$ los niveles de energía correspondientes a los eigenestados $|+\rangle$ y $|-\rangle$, respectivamente. Como estos estados propios son simultáneamente eigenestados de $\hat{S}_z$, el hamiltoniano y $\hat{S}_z$ conmutan, lo que significa que el campo magnético al que están sometidos los electrones se encuentra en la dirección Oz.

En el estado inicial predominan los electrones con espín "hacia abajo", pues es

$$|\psi(0)\rangle = \tfrac{1}{13}\begin{pmatrix} 5i \\ 12 \end{pmatrix} = \tfrac{5}{13} i\,|+\rangle + \tfrac{12}{13}\,|-\rangle\,. \tag{XII.290}$$

En el tiempo t el vector de estado es

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \tfrac{5}{13} i e^{i\mu_B Bt/\hbar}\,|+\rangle + \tfrac{12}{13} e^{-i\mu_B Bt/\hbar}\,|-\rangle \\ &= \tfrac{1}{13}\begin{pmatrix} 5ie^{i\mu_B Bt/\hbar} \\ 12e^{-i\mu_B Bt/\hbar} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{XII.291}$$

El valor medio de $\hat{S}_x(t)$ respecto de este estado es

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{S}_x(t) \right\rangle &= \left\langle \psi(t) \mid \hat{S}_x \mid \psi(t) \right\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{(13)^2}\begin{pmatrix} -5ie^{-i\mu_B Bt/\hbar} & 12e^{i\mu_B Bt/\hbar} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5ie^{i\mu_B Bt/\hbar} \\ 12e^{-i\mu_B Bt/\hbar} \end{pmatrix} \\ &= i\hbar\tfrac{30}{(13)^2}\left(e^{2i\mu_B Bt/\hbar} - e^{-2i\mu_B Bt/\hbar}\right) = -\hbar\tfrac{60}{169}\,\mathrm{sen}\,\frac{2\mu_B Bt}{\hbar}. \end{aligned} \tag{XII.292}$$

Vemos que el espín precede con frecuencia $2\mu_B B/\hbar$ alrededor de la dirección del campo magnético.

XII.42 Construya el operador que describe las rotaciones de un cuerpo rígido.

La rotación general que transforma el sistema de coordenadas (x, y, z) en un nuevo sistema (x', y', z') puede construirse mediante tres rotaciones elementales sucesivas sobre los ángulos de Euler α, β, γ en la siguiente forma:

a) Una rotación alrededor del eje z original por el ángulo α $(0 \le \alpha \le 2\pi)$, que realiza la transformación $(x, y, z) \to (x_1, y_1, z_1)$, con $z_1 = z$. El operador que describe esta transformación es $\hat{D}_\alpha = e^{-i\alpha \hat{J}_z/\hbar}$ (cf. (T9.73)).

b) Una rotación alrededor del nuevo eje y_1 por el ángulo β $(0 \le \beta \le \pi)$, que realiza la transformación $(x_1, y_1, z_1) \to (x_1', y_1', z_1')$, con $y_1 = y_1'$. El operador que describe esta transformación es $\hat{D}_\beta = e^{-i\beta \hat{J}_{y_1}/\hbar}$.

c) Una rotación alrededor del nuevo eje z_1' por el ángulo γ $(0 \le \gamma \le 2\pi)$, que realiza la transformación $(x_1', y_1', z_1') \to (x', y', z')$, con $z_1' = z'$. El operador que describe esta transformación es $\hat{D}_\gamma = e^{-i\gamma \hat{J}_{z_1'}/\hbar}$.

Por lo tanto, el operador que genera la rotación es

$$\hat{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \hat{D}_\gamma \hat{D}_\beta \hat{D}_\alpha = e^{-i\gamma \hat{J}_{z_1'}/\hbar} e^{-i\beta \hat{J}_{y_1}/\hbar} e^{-i\alpha \hat{J}_z/\hbar}. \tag{XII.293}$$

Para referir todo al sistema original de coordenadas aplicamos transformaciones unitarias apropiadas a $\hat{D}_\beta$ y $\hat{D}_\gamma$, como sigue, usando la ley general (T9.49). El operador $e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar}$ lleva el eje y a la posición y_1, por lo que se cumple

$$e^{-i\beta\hat{J}_{y_1}/\hbar} = e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar}e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar}. \tag{XII.294}$$

De manera análoga podemos escribir

$$e^{-i\gamma\hat{J}_{z_1'}/\hbar} = e^{-i\beta\hat{J}_{y_1}/\hbar}e^{-i\gamma\hat{J}_z/\hbar}e^{i\beta\hat{J}_{y_1}/\hbar}. \tag{XII.295}$$

Insertando estas expresiones en (XII.293) se obtiene

$$\begin{aligned}
\hat{D}(\alpha,\beta,\gamma) &= e^{-i\beta\hat{J}_{y_1}/\hbar}e^{-i\gamma\hat{J}_z/\hbar}e^{i\beta\hat{J}_{y_1}/\hbar}e^{-i\beta\hat{J}_{y_1}/\hbar}e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar} \\
&= e^{-i\beta\hat{J}_{y_1}/\hbar}e^{-i\gamma\hat{J}_z/\hbar}e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar} \\
&= e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar}e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar}e^{-i\gamma\hat{J}_z/\hbar}e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar} \\
&= e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar}e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}e^{-i\gamma\hat{J}_z/\hbar}e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar}e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar}.
\end{aligned} \tag{XII.296}$$

Simplificando, queda finalmente

$$\hat{D}(\alpha,\beta,\gamma) = e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar}e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}e^{-i\gamma\hat{J}_z/\hbar}, \tag{XII.297}$$

que es el operador solicitado.

Los elementos de la *matriz de rotación* $D^j_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) = \langle jm'|\,\hat{D}(\alpha,\beta,\gamma)\,|jm\rangle$ son las llamadas *funciones de Wigner*, cuya forma general es

$$D^j_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) = e^{-i(m'\alpha+m\beta)}d^{(j)}_{m'm}(\beta), \tag{XII.298}$$

donde

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \left\langle jm'\right|e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}\left|jm\right\rangle. \tag{XII.299}$$

Las matrices de rotación aparecen de manera natural en la determinación del efecto del operador de rotaciones sobre los eigenvectores de momento angular, al realizar el desarrollo

$$\begin{aligned}
\hat{D}(\alpha,\beta,\gamma)\,|jm\rangle &= \sum_{j'm'}\left|j'm'\right\rangle\left\langle j'm'\right|\hat{D}(\alpha,\beta,\gamma)\,|jm\rangle \\
&= \sum_{j'm'}\left|j'm'\right\rangle\left\langle jm'\right|\hat{D}(\alpha,\beta,\gamma)\,|jm\rangle\,\delta_{j'j} \\
&= \sum_{m'}D^j_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)\left|jm'\right\rangle.
\end{aligned} \tag{XII.300}$$

Esta expresión general puede utilizarse para reobtener fácilmente los eigenvectores de momento angular, tales como (XII.132), (XII.237), etc. La ecuación (XII.300) muestra que los eigenvectores de momento angular $|jm\rangle$ se transforman entre sí frente a una rotación, pero sin que se mezclen valores diferentes de j. En otras palabras, los vectores $\{|jm\rangle \mid -j \le m \le j\}$ para una j dada forman la base de un subespacio invariante (irreducible) del grupo de rotaciones.[10]

[10]Los vectores que pertenecen a una representación irreducible del grupo de rotaciones se mezclan (linealmente) entre sí con la rotación, pero no con los de otras representaciones irreducibles. Esto es lo que significa que se trata de subespacios invariantes (frente a las rotaciones). En particular, si un subespacio invariante contiene una sola componente, ésta no puede combinarse con nada durante la rotación, por lo que permanece invariante: se trata de un escalar, que pertenece a la representación irreducible $\mathbf{D}^{(0)}$ ($j = 0$). A su vez, $\mathbf{D}^{(1)}$ corresponde a un subespacio tridimensional, cuyas leyes de transformación frente a rotaciones se usan para *definir* lo que es un vector, etc. (Véase ejercicio XII.69.)

XII.43 Determine las matrices de momento angular $\mathbf{d}^{(j)}(\beta)$ para momento angular $1/2$ y 1.

Para espín $1/2$ podemos usar (XII.285) y escribir

$$e^{-i\beta\hat{\sigma}_y} = \mathbb{I}\cos\beta - i\hat{\sigma}_y \operatorname{sen}\beta.$$

Con este resultado insertado en (XII.299) obtenemos

$$\mathbf{d}^{(1/2)}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\operatorname{sen}\frac{\beta}{2} \\ \operatorname{sen}\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \tag{XII.301}$$

La matriz completa $\mathbf{D}^{(1/2)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ se obtiene de aquí a partir de (XII.298). Es importante observar que esta matriz cambia de signo con el cambio $\beta \to \beta + 2\pi$; esta duplicidad de valor frente a una rotación de 2π es característica de todas las matrices de rotación para j semientera. La invariancia frente a rotaciones por el ángulo 2π sólo ocurre para j entera (como sucede en el ejemplo que sigue).

Para el caso $j = 1$ es necesario obtener primero el equivalente de (XII.285) para momento angular 1. Las matrices $\hat{J}_i$ están dadas en este caso por las ecuaciones (XII.138)-(XII.140) y poseen la propiedad $\hat{S}_i^3 = \hbar^2\hat{S}_i$ (las raíces de la ecuación $S_3^3 - S_3 = 0$ son $-1, 0, +1$); partiendo de esta relación se puede demostrar que, en particular,

$$e^{-i\beta\hat{S}_y/\hbar} = \left(\mathbb{I} - \frac{\hat{S}_y^2}{\hbar^2}\right) + \frac{\hat{S}_y^2}{\hbar^2}\cos\beta - i\frac{\hat{S}_y}{\hbar}\operatorname{sen}\beta. \tag{XII.302}$$

Combinando con (XII.299) se obtiene

$$\mathbf{d}^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\cos\beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\beta & \frac{1}{2}(1-\cos\beta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\beta & \cos\beta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\beta \\ \frac{1}{2}(1-\cos\beta) & \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\beta & \frac{1}{2}(1+\cos\beta) \end{pmatrix}. \tag{XII.303}$$

Véase el ejercicio XII.55.

XII.44 Considere a los piones como un triplete de isoespín ($I = 1$), con π^+, π^0, π^- correspondiendo a $I_3 = 1,\ 0,\ -1$, respectivamente, y a los nucleones como un doblete de isoespín ($I = 1/2$) con p, n correspondiendo a $I_3 = 1/2,\ -1/2$, respectivamente. Exprese los estados del sistema πN (un pión y un nucleón) en términos de los estados propios del isoespín. *Observación*: las interacciones fuertes conservan el número cuántico total I_3.

Prestando atención exclusivamente al isoespín, podemos escribir, usando la notación simplificada $\pi^+ \equiv |\pi^+\rangle$, etc.,

$$\pi^+ = |1\ 1\rangle\,, \quad \pi^0 = |1\ 0\rangle\,, \quad \pi^- = |1\ -1\rangle\,, \tag{XII.304}$$

$$p = \left|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right\rangle, \quad n = \left|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\right\rangle. \tag{XII.305}$$

Aunque el isoespín *no* es un momento angular interno de las partículas, la descripción matemática de sus multipletes coincide con la de los correspondientes multipletes de momento angular, puesto que se aplica el mismo formalismo. En particular, hay un único estado con $I_3 = 3/2$, que es π^+p, así como un único estado con $I_3 = -3/2$, que es π^-n; ambos estados tienen necesariamente $I = 3/2$. Por

otro lado existen cuatro sistemas con $I_3 = \pm 1/2$, que son $\pi^- p$, $\pi^0 n$, $\pi^+ n$, $\pi^0 p$, los dos primeros con $I_3 = -1/2$ y los dos últimos con $I_3 = +1/2$. Estos cuatro estados son combinaciones lineales de estados propios de isoespín con $I = 3/2$ y $I = 1/2$. Utilizando los resultados para el acoplamiento de momentos angulares $J_1 = 1$, $J_2 = 1/2$ (tabla 12.1 del texto y problema XII.26), podemos separar los estados propios de isoespín en un cuadruplete de $I = 3/2$ y un doblete de $I = 1/2$, como sigue (la notación, frecuente en los textos de partículas elementales, es $\chi^Q_{2I}(I_3)$, donde Q representa la carga eléctrica del estado, en unidades e_0):

a) Cuadruplete de isoespín:

$$\chi_3^{++}(3/2) = \pi^+ p; \tag{XII.306}$$

$$\chi_3^{+}(1/2) = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left(\pi^+ n + \sqrt{2}\pi^0 p\right); \tag{XII.307}$$

$$\chi_3^{0}(-1/2) = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left(\sqrt{2}\pi^0 n + \pi^- p\right); \tag{XII.308}$$

$$\chi_3^{-}(-3/2) = \pi^- n. \tag{XII.309}$$

Este cuadruplete se identifica con las partículas Δ cuya masa se encuentra alrededor de 1236 MeV, y que poseen espín $3/2$.

b) Doblete de isoespín:

$$\chi_1^{+}(1/2) = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left(\sqrt{2}\pi^+ n - \pi^0 p\right); \tag{XII.310}$$

$$\chi_1^{0}(-1/2) = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left(\pi^0 n - \sqrt{2}\pi^- p\right). \tag{XII.311}$$

Este doblete se identifica con las resonancias N^* con masa próxima a 1526 MeV, también con espín $3/2$.

Invirtiendo las expresiones anteriores, se obtienen los estados πN en términos de estados propios del isoespín:

$$\pi^+ p = \chi_3^{++}(3/2), \tag{XII.312}$$

$$\pi^- p = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left(\chi_3^0(-1/2) - \sqrt{2}\chi_1^0(-1/2)\right), \tag{XII.313}$$

$$\pi^0 n = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left(\sqrt{2}\chi_3^0(-1/2) + \chi_1^0(-1/2)\right), \tag{XII.314}$$

y así sucesivamente. Estos resultados muestran que, como producto de la dispersión fuerte, pueden darse procesos como $\pi^- p \to \pi^- p$ o $\pi^- p \to \pi^0 n$, pero no, por ejemplo, $\pi^- p \to \pi^+ n$ (transformación esta última que viola la conservación de I_3, además de la de la carga).

XII.3. Ejercicios

XII.45 Determine la relación entre el momento angular definido en dos diferentes sistemas inerciales de referencia cuando:

a) los sistemas se encuentran en reposo relativo, con orígenes separados una distancia a;

b) los sistemas se mueven con velocidad relativa constante $\mathbf{V}$.

XII.46 Resuelva el problema XII.26, pero aplicando el operador de ascenso al estado que corresponde a la m más baja posible.

XII.47 Demuestre que cualquier función que depende sólo de r es eigenfunción de $\hat{L}_z$ y $\hat{\mathbf{L}}^2$, con ambos eigenvalores iguales a cero, y que cualquier función $g(z,r)$ es eigenfunción de $\hat{L}_z$ con eigenvalor cero. Determine la función propia del operador $\hat{L}_x$ que corresponde al valor propio nulo y momento angular 1.

XII.48 El electrón tiene un espín (momento angular intrínseco) de valor $\hbar/2$. Muestre que el modelo clásico que considera al electrón como una distribución esférica uniforme de masa con un radio igual a su radio clásico ($= e^2/mc^2$) girando sobre sí mismo es insostenible, al menos dentro de un tratamiento no relativista.

XII.49 Demuestre que

$$\left[\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2\right] = \left[\hat{J}_2^2, \hat{J}_3^2\right] = \left[\hat{J}_3^2, \hat{J}_1^2\right].$$

Muestre que para los estados con $J = 0, {}^1\!/_2$ estos conmutadores se anulan.

XII.50 Demuestre que en un estado con $\hat{J}_3$ bien definida, $\left\langle \hat{J}_1 \right\rangle = \left\langle \hat{J}_2 \right\rangle = 0$.

XII.51 Determine la expresión para las eigenfunciones de los operadores $\hat{\mathbf{L}}^2$ y $\hat{L}_z$ en el espacio de momentos.

XII.52 Dado que los operadores $\hat{S}_i$ son las componentes de un vector, se transforman bajo rotaciones siguiendo las leyes de los vectores. Por ejemplo, bajo una rotación alrededor del eje z por un ángulo θ que realiza la transformación $\hat{S} \to \hat{S}'$, se tiene

$$\hat{S}'_x = \hat{S}_x \cos\theta + \hat{S}_y \operatorname{sen}\theta, \qquad \hat{S}'_y = -\hat{S}_x \operatorname{sen}\theta + \hat{S}_y \cos\theta, \qquad \hat{S}'_z = \hat{S}_z.$$

Utilice las reglas de conmutación para $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ y $\hat{S}_z$ para demostrar que las componentes transformadas $\hat{S}'_x$, $\hat{S}'_y$ y $\hat{S}'_z$ satisfacen precisamente las mismas reglas.

XII.53 Un momento angular orbital $\mathbf{L}$ se acopla a un espín $\mathbf{S}$ para producir un estado de momento angular total $\mathbf{J}$. Determine que ángulos entre los vectores $\mathbf{L}$ y $\mathbf{S}$ son permitidos por las reglas cuánticas.

XII.54 La proyección del espín de un electrón sobre el eje Oz es $\hbar/2$ con seguridad. Determine la probabilidad de que la proyección de este espín sobre un cierto eje Oz' tenga el valor $\hbar/2$ o $-\hbar/2$, así como el valor medio de esta proyección.

XII.55 Demuestre que las matrices $\hat{J}_i$ para momento angular 1 (ecuaciones (XII.128)-(XII.130)) poseen la propiedad $\hat{J}_i^3 = \hbar^2 \hat{J}_i$ (que se puede escribir en la forma alternativa $\hat{J}_i(\hat{J}_i + \hbar)(\hat{J}_i - \hbar) = 0$). ¿Cuál es la forma más general de un operador como función de una de las $\hat{J}_i$, para momento angular 1? Derive detalladamente las ecuaciones (XII.241), (XII.242). Las matrices de Pauli cumplen con $\hat{\sigma}_i^2 = \mathbb{I}$; las de momento angular (o espín) 1 cumplen con $\hat{\sigma}_i^3 = \hat{\sigma}_i$, donde se puso $\hat{J}_i = \hbar\hat{\sigma}_i$. ¿Cuál es la regla general?

XII.56 Demuestre que los vectores (XII.132) son efectivamente los eigenvectores de momento angular 1, para los eigenvalores indicados.

XII.57 Considere un sistema de momento angular 1 representado por el vector de estado

$$\psi = \tfrac{1}{\sqrt{26}} \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ -3 \end{pmatrix}.$$

¿Cuál es la probabilidad de que una medición de $\hat{L}_x$ arroje el valor cero?

XII.58 ¿Es posible que un fotón decaiga espontáneamente en dos fotones? ¿Y en tres fotones?

XII.59 Considere un ión con espín 1 caracterizado por el hamiltoniano

$$\hat{H} = D\hat{S}_z^2 + E\left(\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2\right),$$

con D y E constantes, $D \gg E$. Determine los niveles de energía.

XII.60 Un deuterón es un sistema de espín 1. ¿Cuáles son los posibles estados de espín y momento angular total de dos deuterones en un estado de momento angular orbital L?

XII.61 En un problema de partículas sin espín que se mueven en un potencial central, $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ es una función propia del hamiltoniano que corresponde a momento angular l y proyección de éste sobre el eje Oz igual a m (en unidades de $\hbar$). Pruebe que

$$\psi' = e^{i\alpha\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar}\psi_{nlm}(\mathbf{r})$$

es función propia del hamiltoniano con el mismo momento angular total l, independientemente del valor de α y de la orientación del eje $\hat{\mathbf{n}}$. Pero, ¿es también estado propio de $\hat{L}_z$?

XII.62 Considere partículas se mueven en el plano xOy bajo la acción del potencial parabólico $\frac{1}{2}m\omega^2 r^2$. Construya superposiciones de estados $|n_x, n_y\rangle$ que correspondan a la misma energía y que sean funciones propias de $\hat{L}_z$, para $n = 0, 1, 2$.

XII.63 Demuestre que $\hat{O}_{1/2} = \hat{\mathbf{S}}^2 - {}^3\!/_2\,({}^3\!/_2 + 1)$ es un proyector de estados de espín ${}^1\!/_2$ (se tomó $\hbar = 1$).

XII.64 Demuestre que el operador $\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}\left(1 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2\right)$ satisface la regla

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \hat{P}_\sigma = \hat{P}_\sigma \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$$

y deduzca de esta ecuación que $\hat{P}_\sigma$ es el operador de intercambio de espín, es decir, que

$$\hat{P}_\sigma \psi(1,2) = \psi(2,1),$$

donde $\psi(2,1)$ es cualquier función que depende de las coordenadas de espín de las partículas 1 y 2.

XII.65 Sabiendo que la traza de un tensor es invariante frente a rotaciones, demuestre que todo tensor de segundo rango $T_{ij}, i, j = 1, 2, 3$ (9 componentes), puede descomponerse en un escalar (1 componente), un vector (tensor antisimétrico, 3 componentes) y un tensor simétrico de traza nula (5 componentes). Esta separación equivale a una descomposición del espacio producto tensorial $3 \otimes 3$ en las representaciones irreducibles $1 \oplus 3 \oplus 5$ con momento angular 0, 1, 2, respectivamente.

XII.66 Construya explícitamente las matrices $\mathbf{D}^{(j)}_{m'm}(\alpha, \beta, \gamma)$ para $j = 1/2$ y para $j = 1$.

XII.67 Las matrices de momento angular de un cierto sistema contienen 256 hileras y columnas; los valores propios de $\hat{L}_z$ y el número de veces que aparecen cada uno son los dados en la lista:

valor propio:	0	$\pm\frac{1}{2}$	±1	$\pm\frac{3}{2}$	±2
número de veces:	70	56	28	8	1

Determine los 256 valores propios de $\hat{\mathbf{L}}^2$.

XII.68 Considere un espacio de Hilbert bidimensional y demuestre que:

a) Cada estado es eigenestado de algún operador $\hat{\sigma}_{\hat{\mathbf{n}}}$, donde $\hat{\mathbf{n}}$ apunta en una dirección apropiada. Esto se debe a que cada estado puede transformarse en el estado $|+\rangle$ mediante una transformación unitaria. Pero en un espacio bidimensional, cualquier transformación unitaria representa una rotación, pues los grupos de transformación SU(2) y R(3) son isomorfos.

b) Cada observable tiene la forma $\hat{A} = a_0\mathbb{I} + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, con a_0 y a_i reales, y un conjunto de observables $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots$ es mutuamente conmutativo si y sólo si los vectores $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \ldots$ son todos paralelos.

c) Todos los observables que conmutan con un observable $\hat{A}$ no trivial conmutan necesariamente entre sí.

d) Cada observable $\hat{A}$ puede tener sólo dos valores propios, que son $a_0 \pm |\mathbf{a}|$.

XII.69 Una variable dinámica $\hat{\mathbf{V}}$ es un operador vectorial si sus tres componentes cartesianas $\hat{V}_i$ satisfacen las siguientes relaciones de conmutación:

$$\left[\hat{J}_x, \hat{V}_x\right] = 0, \quad \left[\hat{J}_x, \hat{V}_y\right] = i\hbar\hat{V}_z, \quad \left[\hat{J}_x, \hat{V}_z\right] = -i\hbar\hat{V}_y,$$

y sus permutaciones cíclicas, lo que puede escribirse como

$$\left[\hat{J}_i, \hat{V}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\hat{V}_k.$$

Observe que ésta es una generalización natural de las relaciones de conmutación para los operadores de momento angular, que aquí reaparecen por tratarse de un operador vectorial. Esta definición garantiza que el valor esperado de $\hat{V}_i$ se transforma frente a una rotación como las respectivas componentes de un vector.

Demuestre que $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{J}}$ son operadores vectoriales y que no lo son expresiones como $\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{L}}^2$ o $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ (éstos son operadores escalares), pero sí lo pueden ser $\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$, etc. Muestre que un operador vectorial cumple las siguientes reglas de conmutación:

$$\left[\hat{J}_+, \hat{V}_+\right] = 0, \quad \left[\hat{J}_+, \hat{V}_-\right] = 2\hbar\hat{V}_z;$$

$$\left[\hat{J}_-, \hat{V}_+\right] = -2\hbar\hat{V}_z, \quad \left[\hat{J}_-, \hat{V}_-\right] = 0.$$

Demuestre además que se cumple

$$\left[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{V}}\right] = i\left(\hat{\mathbf{V}} \times \hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{V}}\right).$$

Si $\psi' = \hat{U}\psi$ representa el estado alcanzado después de efectuarse una rotación infinitesimal con el operador $\hat{U} = 1 - i\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{J}/\hbar$, demuestre que para un operador vectorial $\hat{\mathbf{A}}$, se puede escribir $\left\langle \hat{A}_i \right\rangle' = \sum_j R_{ij} \left\langle \hat{A}_j \right\rangle$ y determine R_{ij}. La generalización de este resultado permite definir un operador tensorial (de segundo rango) $\mathbf{T}$ como aquél cuyas componentes cartesianas se transforman según la ley

$$\hat{T}'_{ij} = \sum_{kl} R_{ik} R_{jl} \hat{T}_{kl},$$

y así sucesivamente. En particular, un escalar posee una sola componente, invariante frente a rotaciones.

XII.70 Utilizando las propiedades de transformación de un operador vectorial $\hat{\mathbf{A}}$ bajo rotaciones, demuestre que tal operador satisface la ecuación

$$\left[\hat{J}_k, \hat{A}_l\right] = i\varepsilon_{klm}\hat{A}_m.$$

XII.71 Si $\hat{\mathbf{A}}$ es un operador vectorial, demuestre que se satisfacen las siguientes relaciones:

$$\left[\hat{\mathbf{J}}^2, \left[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{A}}\right]\right] = 2\left(\hat{\mathbf{J}}^2\hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{J}}^2\right) - 4\hat{\mathbf{J}}\left(\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{A}}\right),$$

$$\left\langle n'j'\, m' \mid \hat{\mathbf{A}} \mid nj\, m \right\rangle = \frac{\left\langle n'j \mid \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{A}} \mid nj \right\rangle}{j\,(j+1)} \left\langle j\, m' \mid \hat{\mathbf{J}} \mid j\, m \right\rangle.$$

Éste es un caso particular del teorema de Wigner-Eckart. *Sugerencia*: Utilice los resultados del problema XII.24.

XII.72 Calcule $\langle j_1 j_2 j m \mid \mu \mid j_1 j_2 j m \rangle$, donde $\mu = g_1\mathbf{J}_1 + g_2\mathbf{J}_2$, $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$, y $\mathbf{J}_1$ y $\mathbf{J}_2$ son dos momentos angulares independientes.

XII.73 Determine detalladamente la matriz $\hat{U}$ que aparece en la ecuación (XII.137), para pasar de la representación cartesiana a la esférica.

XII.74 Calcule el valor esperado del operador $^1/_2\left(\hat{L}_x\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_x\right)$ y de su cuadrado sobre un eigenestado de $\hat{L}^2$ y de $\hat{L}_z$.

XII.75 Considere una partícula de espín $^1/_2$ atrapada por un potencial central. A continuación, determine a) las funciones de onda que son eigenfunciones simultáneas de los operadores $\hat{L}^2$, $\hat{J}^2$ y $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$. b) Si al hamiltoniano se le agrega un término de interacción de la forma $\gamma\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ con γ pequeña, ¿cuáles son las eigenfunciones del sistema?

XIII. Potenciales centrales. El átomo de hidrógeno

XIII.1. Problemas del texto

XIII.1 Deduzca las relaciones $\hat{\mathbf{p}} = m\widehat{\dot{\mathbf{r}}}$, $\hat{\mathbf{P}} = M\widehat{\dot{\mathbf{R}}}$ para las coordenadas relativa y de centro de masa del problema de dos cuerpos, a partir de las ecuaciones de movimiento de Heisenberg.

El hamiltoniano de un sistema de dos partículas que interaccionan mediante el potencial $V(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)$ es

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + V_1(\hat{\mathbf{r}}_1) + V_2(\hat{\mathbf{r}}_2) + V(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2). \tag{XIII.1}$$

La ecuación de movimiento de Heisenberg (T9.18) aplicada a la variable de posición relativa $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2$ da

$$\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left(\left[\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{H}\right] - \left[\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{H}\right]\right). \tag{XIII.2}$$

Como

$$\left[\hat{\mathbf{r}}_k, \hat{H}\right] = \frac{1}{2m_k}\left[\hat{\mathbf{r}}_k, \hat{\mathbf{p}}_k^2\right] = i\hbar\frac{\hat{\mathbf{p}}_k}{m_k}, \quad k = 1, 2, \tag{XIII.3}$$

sustituyendo se obtiene

$$m\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = m\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_1}{m_1} - \frac{\hat{\mathbf{p}}_2}{m_2}\right) = \hat{\mathbf{p}}, \tag{XIII.4}$$

donde $m = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$ es la masa reducida del sistema. Esta ecuación da el momento relativo como el producto de la masa reducida por el operador de velocidad relativa, $\hat{\mathbf{p}} = m(\hat{\mathbf{v}}_1 - \hat{\mathbf{v}}_2)$.

Por otro lado, de la misma ecuación de Heisenberg, aplicada a la definición de las coordenadas del centro de masa,

$$\hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{M}(m_1\hat{\mathbf{r}}_1 + m_2\hat{\mathbf{r}}_2), \tag{XIII.5}$$

sigue que

$$\frac{d\hat{\mathbf{R}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left(\frac{m_1}{M}\left[\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{H}\right] + \frac{m_2}{M}\left[\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{H}\right]\right) = \frac{1}{M}(\hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2), \tag{XIII.6}$$

es decir

$$M\frac{d\hat{\mathbf{R}}}{dt}=\hat{\mathbf{P}},\quad \hat{\mathbf{P}}=\hat{\mathbf{p}}_1+\hat{\mathbf{p}}_2. \tag{XIII.7}$$

El operador de momento asociado al centro de masa coincide así con el operador del momento total del sistema.

XIII.2 Deduzca detalladamente las ecuaciones de Schrödinger (T13.15) y (T13.16) que separan las variables relativas y CM.

Cuando en la ecuación estacionaria de Schrödinger para un potencial que depende sólo de las coordenadas relativas, ecuación (T13.12),

$$E\Psi=\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2+V(\mathbf{r})\right]\Psi, \tag{XIII.8}$$

se hace la sustitución $\Psi(\mathbf{r},\mathbf{R})=\psi(\mathbf{r})\,\Phi(\mathbf{R})$, se obtiene

$$E\psi(\mathbf{r})\,\Phi(\mathbf{R})=-\frac{\hbar^2}{2M}\psi(\mathbf{r})\,\nabla_R^2\Phi(\mathbf{R})-\frac{\hbar^2}{2m}\Phi(\mathbf{R})\,\nabla_r^2\psi(\mathbf{r})+V(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})\,\Phi(\mathbf{R}).$$

Al dividir entre $\psi\Phi$ queda

$$E=-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\Phi(\mathbf{R})}\nabla_R^2\Phi(\mathbf{R})-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(\mathbf{r})}\nabla_r^2\psi(\mathbf{r})+V(\mathbf{r}). \tag{XIII.9}$$

Esta expresión se separa naturalmente en dos ecuaciones de Schrödinger independientes:

$$E_R\Phi(\mathbf{R})=-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\Phi(\mathbf{R}),\quad E_R=E-E_r, \tag{XIII.10}$$

$$E_r\psi(\mathbf{r})=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2\psi(\mathbf{r})+V(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}), \tag{XIII.11}$$

en donde E_r juega el papel de una constante de separación. La ecuación (XIII.10) describe una partícula libre de masa M con energía E_R, cuya coordenada es la del CM; ésta es la *cuasipartícula* asociada al centro de masa (el cual se mueve por inercia). A su vez, (XIII.11) describe el movimiento de otra cuasipartícula, ésta asociada al movimiento relativo y con masa igual a la masa reducida m, y sometida al potencial $V(\mathbf{r})$ de interacción.

XIII.3 Aplique la ecuación de Schrödinger (T13.4) al estudio de dos partículas libres. Transforme la solución al sistema de coordenadas relativas y CM y use el resultado para mostrar que se cumplen las siguientes relaciones, que son directamente derivables de la teoría general:

$$\mathbf{k}\equiv\frac{\mathbf{p}}{\hbar}=\frac{m_2\mathbf{k}_1-m_1\mathbf{k}_2}{M}=m\left(\frac{\mathbf{k}_1}{m_1}-\frac{\mathbf{k}_2}{m_2}\right),$$

$$\mathbf{K}\equiv\frac{\mathbf{P}}{\hbar}=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,$$

$$E=\frac{\hbar^2K^2}{2M}+\frac{\hbar^2k^2}{2m}.$$

La ecuación (T13.4) es la ecuación estacionaria de Schrödinger para dos partículas interactuantes en presencia de potenciales externos. Por tratarse en el presente caso de dos partículas libres, esta ecuación se reduce a

$$E\Psi\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\right)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2\right)\Psi\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\right). \tag{XIII.12}$$

Para separar las variables seguimos el procedimiento usado en el problema anterior y escribimos $\Psi\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\right)=\psi_1\left(\mathbf{r}_1\right)\psi_2\left(\mathbf{r}_2\right)$ y $E=E_1+E_2$, con lo que se llega a las ecuaciones de partícula libre:

$$\nabla_1^2\psi_1(\mathbf{r}_1)=-\frac{2m_1}{\hbar^2}E_1\psi_1\left(\mathbf{r}_1\right), \tag{XIII.13}$$

$$\nabla_2^2\psi_2(\mathbf{r}_2)=-\frac{2m_2}{\hbar^2}E_2\psi_2\left(\mathbf{r}_2\right). \tag{XIII.14}$$

La solución la tomamos como

$$\psi_1\left(\mathbf{r}_1\right)=A_1\exp\left(i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}_1\right), \tag{XIII.15}$$

$$\psi_2\left(\mathbf{r}_2\right)=A_2\exp\left(i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}_2\right), \tag{XIII.16}$$

con

$$k_i^2=\frac{2m_iE_i}{\hbar^2},\quad i=1,2. \tag{XIII.17}$$

La función de onda del sistema resulta así

$$\Psi\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\right)=\psi_1\left(\mathbf{r}_1\right)\psi_2\left(\mathbf{r}_2\right)=A\exp\left[i\left(\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}_1+\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}_2\right)\right], \tag{XIII.18}$$

con A la constante de normalización.

Introducimos ahora las variables relativa y de centro de masa, ecuaciones (T13.7) y (T13.8),

$$\mathbf{r}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2,\quad \mathbf{R}=\frac{m_1\mathbf{r}_1+m_2\mathbf{r}_2}{M}. \tag{XIII.19}$$

Invirtiendo se obtiene

$$\mathbf{r}_1=\mathbf{R}+\frac{m_2}{M}\mathbf{r},\quad \mathbf{r}_2=\mathbf{R}-\frac{m_1}{M}\mathbf{r}. \tag{XIII.20}$$

De aquí sigue que

$$\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}_1+\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}_2=\left(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2\right)\cdot\mathbf{R}+\left(\frac{m_2}{M}\mathbf{k}_1-\frac{m_1}{M}\mathbf{k}_2\right)\cdot\mathbf{r}. \tag{XIII.21}$$

Sustituyendo en (XIII.18) queda

$$\Psi\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\right)=A\exp\left[i\left(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2\right)\cdot\mathbf{R}+i\left(\frac{m_2}{M}\mathbf{k}_1-\frac{m_1}{M}\mathbf{k}_2\right)\cdot\mathbf{r}\right]. \tag{XIII.22}$$

Es cómodo introducir las variables

$$\mathbf{K}\equiv\frac{\mathbf{P}}{\hbar}=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \tag{XIII.23}$$

$$\mathbf{k}\equiv\frac{\mathbf{p}}{\hbar}=m\left(\frac{\mathbf{k}_1}{m_1}-\frac{\mathbf{k}_2}{m_2}\right), \tag{XIII.24}$$

donde m representa la masa reducida del sistema. En estas variables la solución se separa en el producto de las funciones de onda del CM y del movimiento relativo:

$$\Psi\left(\mathbf{R},\mathbf{r}\right)=A\exp i\left(\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}+\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right)=A\exp\left(i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}\right)\exp i\left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right). \tag{XIII.25}$$

Por otro lado, la energía total del sistema es

$$E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2}. \tag{XIII.26}$$

Como de (XIII.23) y (XIII.24) sigue que

$$\mathbf{k}_1 = \frac{m_1}{M}\mathbf{K} + \mathbf{k}, \quad \mathbf{k}_2 = \frac{m_2}{M}\mathbf{K} - \mathbf{k}, \tag{XIII.27}$$

la energía puede igualmente expresarse como la suma de las contribuciones de las cuasipartículas del sistema:

$$E = \frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{K^2}{M} + k^2\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)\right] = \frac{\hbar^2 K^2}{2M} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{XIII.28}$$

Combinando (XIII.25) y (XIII.28) se obtiene que la función de onda completa se factoriza en el producto de una función de onda que describe el comportamiento del CM y otra asociada al movimiento relativo:

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \Psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{R}, t)\, \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t), \tag{XIII.29}$$

$$\Psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{R}, t) = A_{\mathrm{CM}} e^{-i\hbar K^2 t/2M + i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}, \tag{XIII.30}$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = A_{\mathrm{rel}} e^{-i\hbar k^2 t/2m + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \tag{XIII.31}$$

XIII.4 Considere una molécula diatómica formada con iones de carga $\pm q$ y masas m_1 y m_2, respectivamente. Demuestre que:

a) El campo gravitatorio externo (cerca de la superficie terrestre) produce un efecto sobre el movimiento del CM de la molécula, pero no sobre su movimiento interno (relativo);

b) un campo eléctrico uniforme $\mathcal{E}$ en la dirección del eje Oz no afecta el movimiento del CM, pero sí el interno, debido a que se induce un momento eléctrico dipolar, dado por $(\partial q\mathcal{E}\cdot\mathbf{r}/\partial\mathcal{E}) = qz$. *Sugerencia*: estudie el caso general que corresponde al potencial $V(r) = f_1 z_1 + f_2 z_2$ y particularice.

Consideremos un sistema de dos partículas que interaccionan por medio del potencial $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, además de estar sometidas a un potencial común externo de la forma

$$V_a(r) = f_1 z_1 + f_2 z_2, \tag{XIII.32}$$

con f_1 y f_2 constantes. La ecuación de Schrödinger estacionaria de este sistema es

$$E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + f_1 z_1 + f_2 z_2 + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\right]\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \tag{XIII.33}$$

En términos de las coordenadas relativa y de centro de masa se tiene (con $Z = R_z$, $z = r_z$)

$$f_1 z_1 + f_2 z_2 = (f_1 + f_2) Z + \frac{f_1 m_2 - f_2 m_1}{M} z, \tag{XIII.34}$$

por lo que la ecuación (XIII.33) puede reescribirse en la forma

$$E\Psi\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\right) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2 + \left(f_1+f_2\right)Z + f_r z + V\left(\mathbf{r}\right)\right]\Psi\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\right). \tag{XIII.35}$$

Para simplificar la escritura se ha introducido en (XIII.35) la cantidad

$$f_r = \frac{f_1 m_2 - f_2 m_1}{M}. \tag{XIII.36}$$

Esta ecuación se resuelve con el método de separación de variables escribiendo la función de onda en la forma $\Psi\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2\right) = \Phi\left(\mathbf{R}\right)\psi\left(\mathbf{r}\right)$, lo que conduce al par de ecuaciones de Schrödinger

$$E_R\Phi\left(\mathbf{R}\right) = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\Phi\left(\mathbf{R}\right) + \left(f_1+f_2\right)Z\Phi\left(\mathbf{R}\right), \tag{XIII.37}$$

$$E_r\psi\left(\mathbf{r}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2\psi\left(\mathbf{r}\right) + f_r z\psi\left(\mathbf{r}\right) + V\left(\mathbf{r}\right)\psi\left(\mathbf{r}\right). \tag{XIII.38}$$

Estudiaremos varios casos particulares.

a) Cuando los iones se encuentran en un campo gravitacional uniforme que actúa en la dirección $\hat{\mathbf{z}}$, el potencial externo es

$$V_a = -m_1 g z_1 - m_2 g z_2. \tag{XIII.39}$$

Comparando esta expresión con (XIII.32) resulta $f_1 = -m_1 g$, $f_2 = -m_2 g$, y sigue que $f_1 + f_2 = -Mg$ y $f_1 m_2 - f_2 m_1 = 0$, $f_r = 0$. Por lo tanto, las ecuaciones (XIII.37) y (XIII.38) se reducen a

$$E_R\Phi\left(\mathbf{R}\right) = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\Phi\left(\mathbf{R}\right) - MgZ\Phi\left(\mathbf{R}\right), \tag{XIII.40}$$

$$E_r\psi\left(\mathbf{r}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2\psi\left(\mathbf{r}\right) + V\left(\mathbf{r}\right)\psi\left(\mathbf{r}\right). \tag{XIII.41}$$

Estas ecuaciones muestran que el campo gravitatorio afecta el movimiento del centro de masa, pero no el movimiento relativo.

b) Cuando los iones se encuentran en un campo eléctrico externo $\mathcal{E}$ constante en la dirección del eje $\hat{\mathbf{z}}$ se genera el potencial

$$V_a = q\mathcal{E}z_1 - q\mathcal{E}z_2, \tag{XIII.42}$$

que corresponde a $f_1 = -f_2 = q\mathcal{E}$; en este caso $f_1 + f_2 = 0$ y $f_1 m_2 - f_2 m_1 = f_1 M = f_r M = Mq\mathcal{E}$, y las ecuaciones (XIII.37) y (XIII.38) se reducen a

$$E_R\Phi\left(\mathbf{R}\right) = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\Phi\left(\mathbf{R}\right), \tag{XIII.43}$$

$$E_r\psi\left(\mathbf{r}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2\psi\left(\mathbf{r}\right) + q\mathcal{E}z\psi\left(\mathbf{r}\right) + V\left(\mathbf{r}\right)\psi\left(\mathbf{r}\right). \tag{XIII.44}$$

Vemos que el campo eléctrico no afecta el movimiento del centro de masa, pero sí el movimiento relativo. El ejemplo muestra la importancia que tienen los detalles del acoplamiento al campo externo.

XIII.5 Dos osciladores interaccionan entre sí linealmente, en tal forma que el hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2}m_1\omega^2 x_1^2 + \frac{1}{2}m_2\omega^2 x_2^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\beta\left(x_1 - x_2\right)^2 .$$

Demuestre que las coordenadas relativa y CM coinciden con las coordenadas normales, separe estas variables y determine los valores propios de la energía. Estudie el espectro de energía para los casos atractivo ($\beta > 0$) y repulsivo ($\beta < 0$), en los límites $|\beta| \ll 1$ y $|\beta| \gg 1$.

En el hamiltoniano propuesto

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2}m_1\omega^2 x_1^2 + \frac{1}{2}m_2\omega^2 x_2^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\beta\left(x_1 - x_2\right)^2 , \qquad \text{(XIII.45)}$$

el signo de la constante de acoplamiento β determina si la interacción entre los osciladores es atractiva o repulsiva, es decir, si la interacción incrementa o reduce la energía potencial del sistema. En términos de las coordenadas relativa y de centro de masa

$$y_1 = x_1 - x_2 , \quad y_2 = \frac{m_1}{M}x_1 + \frac{m_2}{M}x_2, \qquad \text{(XIII.46)}$$

donde $M = m_1 + m_2$ es la masa total del sistema, se tiene que

$$x_1 = y_2 + \frac{m_2}{M}y_1, \quad x_2 = y_2 - \frac{m_1}{M}y_1, \qquad \text{(XIII.47)}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \frac{m_1^2}{M^2}\frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + 2\frac{m_1}{M}\frac{\partial^2}{\partial y_1 \partial y_2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2}, \qquad \text{(XIII.48)}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{m_2^2}{M^2}\frac{\partial^2}{\partial y_2^2} - 2\frac{m_2}{M}\frac{\partial^2}{\partial y_1 \partial y_2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2}. \qquad \text{(XIII.49)}$$

El operador de la energía cinética se expresa ahora como

$$\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}, \qquad \text{(XIII.50)}$$

mientras que la energía potencial es

$$\frac{1}{2}m_1\omega^2 x_1^2 + \frac{1}{2}m_2\omega^2 x_2^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\beta\left(x_1 - x_2\right)^2 = \frac{1}{2}m\omega^2(1+\beta)y_1^2 + \frac{1}{2}M\omega^2 y_2^2. \qquad \text{(XIII.51)}$$

El caso particular $\beta = -1$ resulta excepcional, pues desaparece el movimiento relativo, neutralizado por el efecto de la interacción. En este caso los dos osciladores se mueven en fase, formando un sistema "rígido", que oscila alrededor del centro de masa.

En términos de las nuevas variables, la ecuación de Schrödinger es

$$E\Psi\left(y_1, y_2\right) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{1}{2}M\omega^2 y_2^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\left(1+\beta\right)y_1^2\right]\Psi\left(y_1, y_2\right). \qquad \text{(XIII.52)}$$

Para separar variables escribimos

$$\Psi\left(y_1, y_2\right) = \varphi_1\left(y_1\right)\varphi_2\left(y_2\right) \qquad \text{(XIII.53)}$$

y descomponemos la energía en la suma

$$E = E_1 + E_2. \tag{XIII.54}$$

Con esto se llega al sistema de ecuaciones de Schrödinger

$$E_1\varphi_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi_1}{\partial y_1^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(1+\beta\right)y_1^2\varphi_1, \tag{XIII.55}$$

$$E_2\varphi_2 = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\varphi_2}{\partial y_2^2} + \frac{1}{2}M\omega^2 y_2^2\varphi_2, \tag{XIII.56}$$

que describe dos osciladores armónicos independientes siempre y cuando $\beta > -1$ (el caso $\beta < -1$ no lo vamos a analizar aquí). Como esto es precisamente lo que ocurre al pasar a un sistema de coordenadas normales, la pareja de coordenadas relativa y de centro de masa coincide con las coordenadas normales del problema. Esta coincidencia se debe a la igualdad de las frecuencias de los dos osciladores originales.

La frecuencia del oscilador asociado al movimiento relativo y_1 resulta afectada por la interacción, y vale

$$\omega_r \equiv \omega_1 = \omega\sqrt{1+\beta}. \tag{XIII.57}$$

La energía del sistema es la suma de las asociadas a cada una de las dos cuasi-partículas, y se obtiene utilizando la ecuación (T11.31) para los valores propios de la energía de un oscilador armónico. Para el movimiento relativo vale

$$E_{n_1} = \hbar\omega\sqrt{\beta+1}\left(n_1 + \frac{1}{2}\right), \quad n_1 = 0, 1, 2, ..., \tag{XIII.58}$$

mientras que la energía del centro de masa es

$$E_{n_2} = \hbar\omega\left(n_2 + \frac{1}{2}\right), \quad n_2 = 0, 1, 2, ... \tag{XIII.59}$$

La energía total del sistema resulta

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega\left[n_1\sqrt{1+\beta} + n_2 + \frac{1}{2}\left(1+\sqrt{1+\beta}\right)\right]. \tag{XIII.60}$$

Este resultado muestra que la interacción mutua modifica no sólo la energía de los estados excitados, sino también la energía del punto cero, pues la frecuencia de oscilación ha sido afectada. Para valores de β tales que $\sqrt{\beta+1}$ es un número racional, los niveles excitados resultan degenerados; si, por lo contrario, $\sqrt{\beta+1}$ es irracional, no hay degeneración.

Cuando $|\beta| \ll 1$ la interacción mutua de los osciladores puede tomarse como una pequeña corrección a los valores correspondientes a la energía del sistema de dos osciladores independientes:

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega\left(n_1 + n_2 + 1\right) + \frac{1}{2}\beta\hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n_1\right) + \ldots \tag{XIII.61}$$

Esta energía será ligeramente mayor o menor que la de los osciladores desacoplados, dependiendo del signo de β. En el límite opuesto, $\beta \gg 1$, los eigenvalores de la energía pueden aproximarse como

$$E = \hbar\omega\left[\sqrt{\beta}n_1 + n_2 + \frac{1}{2}\sqrt{\beta} + \frac{1}{2} + \ldots\right]. \tag{XIII.62}$$

XIII.6 Demuestre que los coeficientes A_{lm} y B_{lm} que aparecen en las ecuaciones (T13.31) son:

$$\begin{aligned} A_{lm} &= \sqrt{\frac{(l+1-m)\,(l+1+m)}{(2l+1)\,(2l+3)}}, \\ B_{lm} &= \sqrt{\frac{(l+m)\,(l-m)}{(2l+1)\,(2l-1)}}, \\ A^{\pm}_{lm} &= \sqrt{\frac{(l+2\pm m)\,(l+1\pm m)}{(2l+1)\,(2l+3)}}, \\ B^{\pm}_{lm} &= \sqrt{\frac{(l\mp m)\,(l-1\mp m)}{(2l+1)\,(2l-1)}}. \end{aligned}$$

El problema consiste en determinar los factores angulares que aparecen al calcular los elementos de matriz del operador de posición $\langle n'l'm'|\,\hat{\mathbf{r}}\,|nlm\rangle$ requeridos, en particular, para obtener las reglas de selección angulares provenientes de los coeficientes A de Einstein,

$$\mathbf{A}_{nlm,n'l'm'} = \frac{4e^2\omega^3_{nl,n'l'}}{3\hbar c^3}\left|\langle n'l'm'|\,\hat{\mathbf{r}}\,|nlm\rangle\right|^2. \tag{XIII.63}$$

Para problemas centrales el cálculo se factoriza naturalmente en un factor radial y otro angular escribiendo $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{a}}_r$ y $\langle\mathbf{r}\,|nlm\rangle = \langle r\,|nl\rangle\,\langle\hat{\mathbf{a}}_r\,|lm\rangle$, donde $\langle\hat{\mathbf{a}}_r\,|lm\rangle$ es un armónico esférico. Escribiendo, como se hace en (T13.29),

$$\hat{\mathbf{a}}_r = \hat{\mathbf{a}}_+\eta_+ + \hat{\mathbf{a}}_-\eta_- + \hat{\mathbf{a}}_z\eta_z, \tag{XIII.64}$$

$$\hat{\mathbf{a}}_\pm = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{a}}_x \mp i\hat{\mathbf{a}}_y\right), \quad \eta_\pm = \operatorname{sen}\theta e^{\pm i\varphi}, \quad \eta_z = \cos\theta, \tag{XIII.65}$$

se obtiene

$$\begin{aligned} \langle l', m' \mid \eta_+ \mid l, m\rangle &= \int Y^{m'*}_{l'}\operatorname{sen}\theta e^{i\varphi}Y^m_l\,d\Omega \\ &\equiv \left(A^+_{lm}\delta_{l',l+1} + B^+_{lm}\delta_{l',l-1}\right)\delta_{m',m+1}, \qquad \text{(XIII.66)} \\ \langle l', m' \mid \eta_- \mid l, m\rangle &= \int Y^{m'*}_{l'}\operatorname{sen}\theta e^{-i\varphi}Y^m_l\,d\Omega \\ &\equiv \left(A^-_{lm}\delta_{l',l+1} + B^-_{lm}\delta_{l',l-1}\right)\delta_{m',m-1}, \qquad \text{(XIII.67)} \\ \langle l', m' \mid \eta_z \mid l, m\rangle &= \int Y^{m'*}_{l'}\cos\theta Y^m_l\,d\Omega \\ &\equiv \left(A_{lm}\delta_{l',l+1} + B_{lm}\delta_{l',l-1}\right)\delta_{m',m}. \qquad \text{(XIII.68)} \end{aligned}$$

Los números A_{lm}, B_{lm}, $A^\pm_{lm}$, $B^\pm_{lm}$ son los coeficientes que deben obtenerse.

En los cálculos que siguen usaremos la propiedad de ortogonalidad de los armónicos esféricos

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^{m_1*}_{n_1}(\theta,\varphi)\,Y^{m_2}_{n_2}(\theta,\varphi)\operatorname{sen}\theta\,d\theta d\varphi = \delta_{n_1,n_2}\delta_{m_1,m_2} \tag{XIII.69}$$

y las relaciones de recurrencia

$$\begin{aligned} e^{i\varphi}\,\mathrm{sen}\,\theta Y_l^m &= -\sqrt{\frac{(l+m+1)\,(l+m+2)}{(2l+1)\,(2l+3)}}Y_{l+1}^{m+1} \\ &\quad +\sqrt{\frac{(l-m)\,(l-m-1)}{(2l-1)\,(2l+1)}}Y_{l-1}^{m+1}, \end{aligned} \tag{XIII.70}$$

$$\begin{aligned} e^{-i\varphi}\,\mathrm{sen}\,\theta Y_l^m &= \sqrt{\frac{(l-m+1)\,(l-m+2)}{(2l+1)\,(2l+3)}}Y_{l+1}^{m-1} \\ &\quad -\sqrt{\frac{(l+m)\,(l+m-1)}{(2l-1)\,(2l+1)}}Y_{l-1}^{m-1}, \end{aligned} \tag{XIII.71}$$

$$\begin{aligned} \cos\theta Y_l^m &= \sqrt{\frac{(l-m+1)\,(l+m+1)}{(2l+1)\,(2l+3)}}Y_{l+1}^{m} \\ &\quad +\sqrt{\frac{(l-m)\,(l+m)}{(2l-1)\,(2l+1)}}Y_{l-1}^{m}. \end{aligned} \tag{XIII.72}$$

Con ayuda de estas propiedades, se obtiene de inmediato

$$\begin{aligned} \langle l', m' \mid \eta_+ \mid l, m\rangle &= \int Y_{l'}^{m'*}\mathrm{sen}\,\theta e^{i\varphi}Y_l^m\,d\Omega \\ &= -\sqrt{\frac{(l+m+1)\,(l+m+2)}{(2l+1)\,(2l+3)}}\int Y_{l'}^{m'*}Y_{l+1}^{m+1}\,d\Omega \\ &\quad +\sqrt{\frac{(l-m)\,(l-m-1)}{(2l-1)\,(2l+1)}}\int Y_{l'}^{m'*}Y_{l-1}^{m+1}\,d\Omega \\ &= -\sqrt{\frac{(l+m+1)\,(l+m+2)}{(2l+1)\,(2l+3)}}\delta_{l',l+1}\delta_{m',m+1} \\ &\quad +\sqrt{\frac{(l-m)\,(l-m-1)}{(2l-1)\,(2l+1)}}\delta_{l',l-1}\delta_{m',m+1}. \end{aligned}$$

Comparando con la ecuación (XIII.66) sigue que

$$A_{lm}^{+} = -\sqrt{\frac{(l+m+1)\,(l+m+2)}{(2l+1)\,(2l+3)}}, \tag{XIII.73}$$

y

$$B_{lm}^{+} = \sqrt{\frac{(l-m)\,(l-m-1)}{(2l-1)\,(2l+1)}}. \tag{XIII.74}$$

De manera análoga se demuestra que

$$\begin{aligned}
\langle l', m' \mid \eta_- \mid l, m \rangle &= \int Y_{l'}^{m'*} \operatorname{sen}\theta e^{-i\varphi} Y_l^m \, d\Omega \\
&= \sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)}} \int Y_{l'}^{m'*} Y_{l+1}^{m-1} \, d\Omega \\
&\quad - \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l-1)(2l+1)}} \int Y_{l'}^{m'*} Y_{l-1}^{m-1} \, d\Omega \\
&= \sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)}} \delta_{l',l+1} \delta_{m',m-1} \\
&\quad - \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l-1)(2l+1)}} \delta_{l',l-1} \delta_{m',m-1},
\end{aligned}$$

que comparado con (XIII.67) da

$$A_{lm}^- = \sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}, \tag{XIII.75}$$

$$B_{lm}^- = -\sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l-1)(2l+1)}}. \tag{XIII.76}$$

Por último,

$$\begin{aligned}
\langle l', m' \mid \eta_z \mid l, m \rangle &= \int Y_{l'}^{m'*} \cos\theta Y_l^m \, d\Omega \\
&= \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} \int Y_{l'}^{m'*} Y_{l+1}^{m} \, d\Omega \\
&\quad + \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}} \int Y_{l'}^{m'*} Y_{l-1}^{m} \, d\Omega \\
&= \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} \delta_{l',l+1} \delta_{m',m} \\
&\quad + \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}} \delta_{l',l-1} \delta_{m',m}.
\end{aligned}$$

Comparando con la ecuación (XIII.68) se obtiene:

$$A_{lm} = \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}, \tag{XIII.77}$$

$$B_{lm} = \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}}. \tag{XIII.78}$$

XIII.7 Utilice la fórmula $a_0 = \hbar^2/me^2$ para estimar el orden de magnitud de la energía del estado base del átomo de H.

Para hacer una estimación simple de la energía del estado base del átomo de hidrógeno recurrimos al teorema del virial, que establece que para un átomo en un estado estacionario los valores medios de la energía cinética, potencial y total satisfacen la relación

$$\langle T\rangle = -\frac{1}{2}\langle V\rangle = -E. \tag{XIII.79}$$

Adoptaremos como medida del tamaño de un átomo de H en su estado base el llamado *radio de Bohr* a_0, dado por la ecuación (T13.44) y que tiene el valor

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \simeq 0.53 \times 10^{-8}\ \text{cm}. \tag{XIII.80}$$

Tomando como energía potencial media la que posee un electrón a distancia a_0 del núcleo, la energía del estado base resulta

$$E = \frac{1}{2}\langle V\rangle = -\frac{Z^2e^2}{2a_0} \simeq -13.6\ \text{eV para } Z = 1. \tag{XIII.81}$$

Este resultado coincide casualmente con el exacto, pues los valores permitidos para la energía del átomo hidrogenoide están dados por la ecuación (T13.51),

$$E = -\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2}, \tag{XIII.82}$$

que se reduce exactamente a la que se obtuvo para $n = 1$. La coincidencia muestra que la argumentación usada para llegar a la expresión (XIII.81) es cualitativamente sólida, pero no deja de ser casual.

XIII.8 Determine el coeficiente de normalización de la función de onda radial del átomo hidrogenoide.

Con la notación $\rho = 2\alpha r$, $\alpha = \sqrt{-2mE}/\hbar$, la función de onda radial del átomo hidrogenoide se puede escribir en la forma

$$R_{nl}(\rho) = C_{nl}\rho^l e^{-\rho/2} Q^{2l+1}_{n-l-1}(\rho), \tag{XIII.83}$$

donde Q^k_n son polinomios asociados de Laguerre, que en la representación de Rodrigues están dados por la ecuación (T13.48),

$$\begin{aligned} Q^k_n(\rho) &= \frac{1}{n!}e^\rho\rho^{-k}\frac{d^n}{d\rho^n}\left(e^{-\rho}\rho^{n+k}\right) \\ &= \sum_{s=0}^{n}(-1)^s\,\frac{(n+m)!}{s!\,(n-s)!\,(m+s)!}\rho^s. \end{aligned} \tag{XIII.84}$$

En términos de los polinomios de Laguerre, dados por la fórmula de Rodrigues

$$L_n(x) = \frac{1}{n!}e^x\frac{d^n}{dx^n}x^ne^{-x}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{XIII.85}$$

los polinomios asociados de Laguerre se expresan en la forma

$$Q^k_n(x) = (-1)^k\frac{d^k}{dx^k}L_{n+k}(x), \quad k = 0, 1, 2, \ldots \tag{XIII.86}$$

Estos polinomios satisfacen la condición de ortonormalidad

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^k Q_n^k(\rho)Q_m^k(\rho)\,d\rho = \frac{(n+k)!}{n!}\delta_{nm} \tag{XIII.87}$$

y poseen la propiedad integral

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{k+1} Q_n^k(\rho)Q_n^k(\rho)\,d\rho = \frac{(n+k)!}{n!}\,(2n+k+1)\,. \tag{XIII.88}$$

De la condición de normalización $\int_0^\infty r^2 R_{nl}^2\,(r)\,dr = 1$ escrita en términos de la variable $\rho = 2\alpha r$ y usando (XIII.83), sigue que

$$\frac{1}{8\alpha^3}\int_0^\infty \rho^2 R_{nl}^2(\rho)\,d\rho = \frac{C_{nl}^2}{8\alpha^3}\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{2l+2} Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\,d\rho = 1,$$

de donde, con ayuda de la fórmula (XIII.88), se obtiene

$$\frac{C_{nl}^2}{8\alpha^3}\frac{2n\,(n+l)!}{(n-l-1)!} = 1.$$

Introduciendo además la ecuación (T13.49), $\alpha = Z/a_0 n$, queda finalmente[1]

$$C_{nl} = \frac{2}{n^2}\sqrt{\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}\,. \tag{XIII.89}$$

XIII.9 Mediante la comparación de las correspondientes ecuaciones diferenciales muestre que los polinomios de Laguerre se pueden escribir como una función hipergeométrica confluente en la forma

$$Q_k^{2l+1}(\rho) = {}_1F_1\,(-k, 2\,(l+1)\,;\rho)\,.$$

Use su resultado para obtener los valores físicamente aceptables del número cuántico k.

La ecuación diferencial hipergeométrica confluente (llamada en ocasiones ecuación de Kummer)[2]

$$xy''\,(x) + (c-x)\,y'\,(x) - ay\,(x) = 0 \tag{XIII.90}$$

tiene como solución a la función hipergeométrica confluente, denotada comúnmente como ${}_1F_1\,(a,c;x)$ o como $M\,(a,c;x)$. Específicamente,

$$\begin{aligned} y\,(x) &= {}_1F_1\,(a,c;x) \equiv M\,(a,c;x) \\ &= 1 + \frac{a}{c}\frac{x}{1!} + \frac{a\,(a+1)}{c\,(c+1)}\frac{x^2}{2!} + \frac{a\,(a+1)\,(a+2)}{c\,(c+1)\,(c+2)}\frac{x^3}{3!} + \ldots, \end{aligned} \tag{XIII.91}$$

con $c \neq 0, -1, -2, \ldots$. Esta función es convergente para toda x finita, y en términos de los *símbolos de Pochhammer*

$$(a)_n = \frac{(a+n-1)!}{(a-1)!}, \quad (a)_0 = 1, \tag{XIII.92}$$

[1] Véase nota al final del capítulo.
[2] Véase, por ejemplo, Arfken (1985), p.753.

se escribe como

$$M\left(a,c;x\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(a\right)_n}{\left(c\right)_n}\frac{x^n}{n!}. \tag{XIII.93}$$

A su vez, los polinomios asociados de Laguerre $y\equiv Q_k^{2l+1}(x)$ son solución de la ecuación de Laguerre (T13.46),

$$xy''(x)+\left[2\left(l+1\right)-x\right]y'(x)+\left(\frac{Z}{\alpha a_0}-l-1\right)y(x)=0. \tag{XIII.94}$$

Comparando esta ecuación con (XIII.90) vemos que ambas coinciden si se toma

$$c=2\left(l+1\right),\quad a=l+1-\frac{Z}{\alpha a_0}\equiv -k. \tag{XIII.95}$$

Con esta correspondencia, los polinomios asociados de Laguerre se pueden escribir como la función hipergeométrica confluente

$$Q_k^{2l+1}(\rho)={}_1F_1\left(-k,2\left(l+1\right);\rho\right), \tag{XIII.96}$$

donde ha de satisfacerse que

$$2\left(l+1\right)\neq 0,-1,-2,\ldots \tag{XIII.97}$$

Para determinar los valores físicamente aceptables de k observamos que de (XIII.91) sigue que $M(a,c;x)$ se reduce a un polinomio si y sólo si el parámetro a es un entero negativo, es decir, si

$$a=-k,\quad \text{con } k=0,1,2,3,\ldots \tag{XIII.98}$$

Como esta elección reduce $Q_k^{2l+1}(\rho)$ a un polinomio, se garantiza con ella el decaimiento exponencial de la función de onda hidrogenoide en el infinito. En estas condiciones es natural que la igualdad (XIII.98) equivalga a la condición de cuantización (T13.49) para el átomo hidrogenoide, es decir,

$$\frac{Z\alpha}{a_0}=k+l+1=n. \tag{XIII.99}$$

XIII.10 Demuestre que la solución radial regular para un oscilador armónico con potencial $\frac{1}{2}m\omega^2r^2$ es

$$u=Ce^{-\xi^2/2}\xi^{l+1}\,{}_1F_1\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{E}{\hbar\omega}-l-\frac{3}{2}\right),l+\frac{3}{2};\xi^2\right),$$

donde $\xi=\sqrt{m\omega/\hbar}r$ y ${}_1F_1\left(a,c;x\right)$ es una función hipergeométrica confluente. Determine los valores propios de la energía.

Considerando el problema como el de tres osciladores armónicos independientes unidimensionales, obtenga los primeros niveles de energía. Compare resultados y estudie la degeneración cotejando ambos puntos de vista.

La ecuación de onda radial para un oscilador armónico se obtiene de la ecuación (T13.24), y es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2}+\left[\frac{\hbar^2l\left(l+1\right)}{2mr^2}+\frac{1}{2}m\omega^2r^2\right]u=Eu. \tag{XIII.100}$$

Con el cambio de variable $\xi = (m\omega/\hbar)^{1/2} r$, esta ecuación se reduce a

$$u'' - \left[\frac{l\,(l+1)}{\xi^2} + \xi^2 - \frac{2E}{\hbar\omega}\right] u = 0. \tag{XIII.101}$$

Un análisis similar al efectuado en el texto para el átomo hidrogenoide muestra que una forma de garantizar el comportamiento asintótico de u, tanto para $\xi \to 0$ como para $\xi \to \infty$, se obtiene al escribir la función radial en la forma

$$u = Ce^{-\xi^2/2}\xi^{l+1}Q, \tag{XIII.102}$$

y demandar que la función $Q(\xi)$ sea finita en el origen y crezca a lo sumo como una potencia en el infinito. La sustitución de esta expresión en (XIII.101) conduce a la ecuación diferencial

$$Q'' + \left(\frac{2\,(l+1)}{\xi} - 2\xi\right) Q' - \left(2l + 3 - \frac{2E}{\hbar\omega}\right) Q = 0. \tag{XIII.103}$$

Comparando con la ecuación diferencial para la función hipergeométrica confluente $y\left(x^2\right) \equiv {}_1F_1\left(a, c; x^2\right)$,

$$\frac{d^2}{dx^2} y\left(x^2\right) + \left(\frac{2c-1}{x} - 2x\right) \frac{d}{dx} y\left(x^2\right) - 4a y\left(x^2\right) = 0, \tag{XIII.104}$$

resulta que la solución de la ecuación (XIII.103) es

$$Q(\xi) = {}_1F_1\left(\frac{l}{2} + \frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}, l + \frac{3}{2}; \xi^2\right). \tag{XIII.105}$$

Con esto la solución radial resulta

$$u = Ce^{-\xi^2/2}\xi^{l+1}\,{}_1F_1\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{E}{\hbar\omega} - l - \frac{3}{2}\right), l + \frac{3}{2}; \xi^2\right). \tag{XIII.106}$$

Es necesario aún imponer la condición que reduce ${}_1F_1$ a un polinomio, es decir,

$$\frac{1}{2}\left(\frac{E}{\hbar\omega} - l - \frac{3}{2}\right) = n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{XIII.107}$$

De aquí sigue para los eigenvalores de la energía del oscilador isotrópico:

$$E_{nl} = \hbar\omega\left(2n + l + \frac{3}{2}\right). \tag{XIII.108}$$

Cada estado se caracteriza por la pareja de números cuánticos n y l, pero los niveles de energía dependen de un único número cuántico, dado por la combinación lineal

$$N = 2n + l, \quad N = 0, 1, 2, \ldots, \tag{XIII.109}$$

$$E = \hbar\omega\left(N + \frac{3}{2}\right). \tag{XIII.110}$$

N es el número cuántico principal; el momento angular l puede tomar los valores enteros que van desde 0 ó 1 hasta N (ver abajo). Cada valor de $N \geq 2$ puede ser

obtenido como combinación de distintos valores de n y l, por lo que todos estos niveles de energía son degenerados.

Por otro lado, considerando al oscilador isotrópico como tres osciladores unidimensionales de igual frecuencia, la energía resulta

$$E = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right), \quad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \ldots \tag{XIII.111}$$

Comparando ambos resultados se obtiene

$$N = 2n + l = n_x + n_y + n_z. \tag{XIII.112}$$

Esta expresión muestra que el grado de la degeneración g del oscilador isotrópico está dado por el número de combinaciones de los tres números cuánticos n_x, n_y, n_z que cumplen la condición $N = n_x + n_y + n_z$ para N dada. Para determinar la g_N que corresponde a una N dada, le asignamos a n_x alguno de los valores $0, 1, 2, \ldots, N$, lo que deja $n_y + n_z = N - n_x$. Las combinaciones posibles son

$$(n_y, n_z) = (0, N - n_x), (1, N - n_x - 1), (2, N - n_x - 2), \ldots, (N - n_x, 0),$$

y suman $N - n_x + 1$ alternativas. Por lo tanto,

$$g_N = \sum_{n_x=0}^{N} (N - n_x + 1) = (N + 1) \sum_{n_x=0}^{N} 1 - \sum_{n_x=0}^{N} n_x = \frac{1}{2} (N + 1)(N + 2). \tag{XIII.113}$$

Este resultado corrobora que sólo el estado base $N = 0$ es no degenerado.

El análisis de las posibles combinaciones de los números cuánticos n, l y del grado de degeneración en términos de ellos es un poco más complicado. Dada una energía (es decir, dada N), las posibles combinaciones son:

a) Para N par: $(2n, l) = (0, N), (2, N-2), (4, N-4), \ldots (N-2, 2), (N, 0)$;

b) Para N impar: $(2n, l) = (0, N), (2, N-2), (4, N-4), \ldots (N-3, 3), (N-1, 1)$.

De aquí sigue que los posibles valores del momento angular son, para los estados más bajos,

$$\begin{aligned} N = 0 &: \quad l = 0 \\ N = 1 &: \quad l = 1 \\ N = 2 &: \quad l = 0, 2 \\ N = 3 &: \quad l = 1, 3 \\ N = 4 &: \quad l = 0, 2, 4, \text{etc.} \end{aligned}$$

El grado de degeneración resulta

$$g_N = \sum_s (2s + 1). \tag{XIII.114}$$

La suma sobre s corre desde 0 hasta N por los pares si N es par, y desde 1 hasta N por los impares si N es impar. En ambos caso el resultado es $\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$, como se había determinado ya.

XIII.11 Demuestre que cuando $l = n-1$, la función hidrogenoide $r^2R_{nl}^2$ tiene sólo un máximo, que se localiza en $r = a_0n^2/Z$.

La función radial del átomo de hidrógeno está dada por la ecuación (XIII.83), con $Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$ un polinomio asociado de Laguerre. Estos polinomios pueden escribirse en términos de los polinomios de Laguerre en la forma (cf. (TA.50))

$$Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) = (-1)^{2l+1}\frac{d^{2l+1}}{d\rho^{2l+1}}L_{n+l}(\rho). \tag{XIII.115}$$

El polinomio L_{n+l} es de grado $n+l$, y sus $n+l$ ceros son todos distintos y se localizan sobre el eje real positivo. Por lo tanto, $Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$ tiene $n+l-(2l+1) = n-l-1$ ceros, cada uno de los cuales es un nodo de la función de onda. De aquí sigue que la distribución de densidad de probabilidad $P(\rho) = r^2R_{nl}^2(\rho)$ tiene $n-l$ extremos y, en particular, que para $l = n-1$ existe un solo máximo y ningún nodo (el origen de coordenadas se excluye de estas consideraciones).

Es posible localizar, en general, el máximo único del caso $l = n-1$. Cuando se satisface esta relación se cumple también que

$$P(\rho) = \frac{1}{4\alpha^2}C_{nl}^2\rho^{2n}e^{-\rho}, \tag{XIII.116}$$

pues $Q_0^m(\rho) = 1$; derivando respecto a $\rho = 2\alpha r$ e igualando a cero se obtiene que el máximo ocurre para $\rho = 2n$, es decir, en

$$r = \frac{n}{\alpha}. \tag{XIII.117}$$

Como de (T13.49) sigue que $\alpha = Z/na_0$, el máximo está localizado en

$$r = \frac{a_0}{Z}n^2. \tag{XIII.118}$$

Este resultado es interesante, pues coincide con el radio del átomo de Bohr para el caso de órbitas circulares. Por esta razón se acostumbra considerar a los estados propios hidrogenoides de Schrödinger que corresponden a $l = n-1$ como el equivalente cuántico de las órbitas circulares. Sin embargo, no debe olvidarse el carácter convencional de esta identificación, como se explica en el problema XII.8 y se discute en el siguiente. Valores menores de l (no puede haber l's mayores) corresponden a distribuciones de probabilidad con un número de máximos mayor que uno. Es posible mostrar que cada una de estas últimas soluciones corresponde efectivamente a órbitas elípticas en el límite de números cuánticos muy grandes.

XIII.12 Demuestre que la excentricidad de las órbitas hidrogenoides puede tomarse como $\epsilon = \sqrt{1 - l(l+1)/n^2}$. Observe de aquí que la mínima excentricidad (lo más cercano posible a órbitas circulares) corresponde a $l = n-1$, y es $\epsilon_{\text{mín}} = 1/\sqrt{n}$, que tiende a cero cuando $n \to \infty$.

Los puntos de retorno (que corresponden al máximo y al mínimo valor del radio vector) en el problema clásico de Kepler están dados por los valores de r que resuelven la ecuación

$$\frac{p_r^2}{2m_0} = E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\mathbf{L}^2}{2m_0r^2} \tag{XIII.119}$$

cuando se pone $p_r = 0$. Estas soluciones son

$$r_{\substack{\text{máx}\\\text{mín}}} = \frac{Ze^2}{2\,|E|}\left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{2\,|E|}{Z^2e^4m_0}\mathbf{L}^2}\right). \tag{XIII.120}$$

Si en esta expresión se introducen los valores propios de la energía del átomo hidrogenoide, ecuación (T13.51),

$$E_n = -\frac{Z^2e^4m_0}{2\hbar^2n^2}, \tag{XIII.121}$$

y del momento angular, ecuación (T12.64),

$$\left\langle \hat{\mathbf{L}}^2 \right\rangle = \hbar^2 l(l+1), \tag{XIII.122}$$

se obtiene

$$r_{\substack{\text{máx}\\\text{mín}}} = \frac{n^2a_0}{Z}\left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{l(l+1)}{n^2}}\right). \tag{XIII.123}$$

La excentricidad de una órbita elíptica se define en términos de los semiejes mayor a y menor b como

$$\epsilon = \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}}, \tag{XIII.124}$$

y en términos de ella se puede escribir

$$r_{\substack{\text{máx}\\\text{mín}}} = a(1 \pm \epsilon). \tag{XIII.125}$$

Comparando esta ecuación con (XIII.123) se obtiene la pareja de identificaciones

$$a = \frac{n^2a_0}{Z}; \quad \epsilon = \sqrt{1 - \frac{l(l+1)}{n^2}}. \tag{XIII.126}$$

El primero de estos resultados muestra que el análogo cuántico del semieje mayor de las órbitas elípticas es la cantidad $(a_0/Z)\,n^2$; la ecuación (XIII.118) es el caso particular de esta definición para órbitas circulares. El segundo resultado da una posible definición de la excentricidad, y coincide con la expresión propuesta en el enunciado. Como $l \leq n-1$, la excentricidad definida así no puede anularse (caso este último que en la teoría clásica corresponde a órbitas circulares); el mínimo valor que puede alcanzar ocurre precisamente para $l = n-1$ y es $\epsilon_{\text{mín}} = \sqrt{1/n}$. Con esta definición, las órbitas "circulares" cuánticas corresponden a las de menor excentricidad para una energía (es decir, una n) dada. Para l finita, la excentricidad definida por la ecuación (XIII.126) se aproxima a la unidad en el límite $n \to \infty$, lo que corresponde a órbitas infinitamente elongadas; sin embargo, $\epsilon_{\text{mín}} \to 0$ cuando $n \to \infty$, como corresponde a órbitas circulares.

Es interesante reexpresar el resultado anterior en términos del número cuántico $k = n - l - 1$ (ecuación (T13.49)),

$$\epsilon = \frac{\sqrt{k^2 + (2k+1)(l+1)}}{k+l+1}. \tag{XIII.127}$$

Para el valor mínimo de k ($k = 0$) se obtiene la mínima excentricidad $1/\sqrt{l+1} = 1/\sqrt{n}$, mientras que para la k máxima ($k = n-1$) y $l = 0$ se obtiene la máxima

excentricidad, $\epsilon = 1$ (elipses infinitamente elongadas). Estos resultados sugieren interpretar el número k como una medida de la excentricidad de las órbitas. Así, el número cuántico principal queda expresado como una contribución del momento angular más una contribución de la excentricidad, combinación que define la energía del estado.[3]

Una forma alterna de ver este problema se obtiene a través del llamado *vector de excentricidad* o *de Laplace-Runge-Lenz*, que se define como[4]

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{1}{2Ze^2m_0}\left(\mathbf{L}\times\mathbf{p} - \mathbf{p}\times\mathbf{L}\right). \tag{XIII.128}$$

En el problema clásico de Kepler se demuestra que, debido a que $\mathbf{A}\cdot\mathbf{L} = 0$, $\mathbf{A}$ es un vector fijo en el espacio que apunta en la dirección del perihelio de la órbita, y con magnitud igual a la excentricidad, $A = \epsilon$. Estas propiedades pueden transportarse al caso cuántico y conducen a una definición (formal, si se prefiere) de la excentricidad, muy cercana (aunque no idéntica) a la ecuación (XIII.126).

XIII.13 Derive los siguientes resultados para el valor esperado de r^n para el átomo hidrogenoide, donde $\rho_{\mathsf{at}} = r/a_0$ está medido en unidades atómicas ($m = \hbar = e = 1$), es decir, $\rho_{\mathsf{at}} = (2n/Z)\rho$:

$$\langle\rho_{\mathsf{at}}\rangle = \frac{1}{2Z}\left[3n^2 - l\,(l+1)\right]; \qquad \langle\rho_{\mathsf{at}}^2\rangle = \frac{n^2}{2Z^2}\left[5n^2 + 1 - 3l\,(l+1)\right];$$

$$\left\langle\frac{1}{\rho_{\mathsf{at}}}\right\rangle = \frac{Z}{n^2}; \qquad \left\langle\frac{1}{\rho_{\mathsf{at}}^2}\right\rangle = \frac{Z^2}{n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)}; \qquad \left\langle\frac{1}{\rho_{\mathsf{at}}^3}\right\rangle = \frac{Z^3}{n^3 l\,(l+1)\left(l+\frac{1}{2}\right)}.$$

El valor esperado de r^k para el átomo hidrogenoide es

$$\left\langle r^k\right\rangle = \int_0^\infty dr\; r^{2+k}R_{nl}^2 \tag{XIII.129}$$

con la $R_{nl}(\rho)$ dada en (XIII.83). Con $\rho = 2\alpha r$ se obtiene directamente

$$\langle r\rangle = \frac{C_{nl}^2}{16\alpha^4}\int_0^\infty \rho^{2l+3}e^{-\rho}\left(Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right)^2 d\rho. \tag{XIII.130}$$

Esta integral se puede evaluar utilizando la relación de recurrencia para los polinomios de Laguerre

$$\rho Q_n^k = (2n+k+1)\,Q_n^k - (n+k)\,Q_{n-1}^k - (n+1)\,Q_{n+1}^k, \tag{XIII.131}$$

y las propiedades (XIII.88) y de ortogonalidad (XIII.87). Combinándolas apropiadamente se llega a

$$\langle r\rangle = \tfrac{C_{nl}^2}{16\alpha^4}\left(6n^2 - 2l^2 - 2l\right)\textstyle\int_0^\infty \rho^{2l+1}e^{-\rho}Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\,d\rho,$$

$$\langle r\rangle = \tfrac{C_{nl}^2}{16\alpha^4}\left(6n^2 - 2l^2 - 2l\right)\tfrac{(n+l)!}{(n-l-1)!}. \tag{XIII.132}$$

[3]La interpretación sugerida aquí es consistente con la interpretación de ensamble de la mecánica cuántica, según la cual la partícula preserva todo el tiempo su naturaleza corpuscular (localizada), independientemente de que puedan o no tener lugar efectos ondulatorios. En la interpretación ortodoxa la noción de trayectoria de los corpúsculos cuánticos se descarta enteramente, por lo que dentro de ella sólo tienen sentido los aspectos formales del cálculo anterior.

[4]En la literatura se le conoce más frecuentemente como vector de Runge-Lenz, pero ya aparece discutido en la obra de Laplace. Una introducción al tema puede verse en Goldstein (1980), sección 3–9.

Sustituyendo el valor de la constante de normalización dado por (XIII.89) y el valor $\alpha = Z/na_0$ (ecuación (T13.49)), se obtiene

$$\langle r\rangle = \frac{a_0}{2Z}\left[3n^2 - l\,(l+1)\right], \tag{XIII.133}$$

que reexpresado en unidades atómicas $\rho_{\rm at} = r/a_0$ conduce al resultado solicitado:

$$\langle \rho_{\rm at}\rangle = \frac{1}{2Z}\left[3n^2 - l\,(l+1)\right]. \tag{XIII.134}$$

Para calcular $\langle r^2\rangle$ procedemos de manera análoga:

$$\begin{aligned}
\langle r^2\rangle &= \frac{C_{nl}^2}{32\alpha^5}\int_0^\infty \rho^{2l+4}e^{-\rho}\left(Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right)^2 d\rho. \\
&= \frac{C_{nl}^2}{32\alpha^5}4n\left[5n^2+1-3l\,(l+1)\right] \\
&\quad\times\int_0^\infty \rho^{2l+1}e^{-\rho}Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\,Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\;d\rho \\
&= \frac{C_{nl}^2}{32\alpha^5}4n\left[5n^2+1-3l\,(l+1)\right]\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}.
\end{aligned} \tag{XIII.135}$$

Sustituimos aquí la expresión (XIII.89) y usamos $\alpha = Z/na_0$ para llegar a

$$\begin{aligned}
\langle r^2\rangle &= \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3\frac{1}{2n^3\alpha^5}\left[5n^2+1-3l\,(l+1)\right] \\
&= \frac{n^2a_0^2}{2Z^2}\left[5n^2+1-3l\,(l+1)\right],
\end{aligned} \tag{XIII.136}$$

o bien, en unidades atómicas,

$$\langle \rho_{\rm at}^2\rangle = \frac{n^2}{2Z^2}\left[5n^2+1-3l\,(l+1)\right]. \tag{XIII.137}$$

Para continuar escribimos

$$\begin{aligned}
\left\langle\frac{1}{\rho_{\rm at}}\right\rangle = a_0\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle &= \frac{a_0C_{nl}^2}{4\alpha^2}\int_0^\infty \rho^{2l+1}e^{-\rho}Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\,d\rho \\
&= \frac{a_0C_{nl}^2}{4\alpha^2}\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}
\end{aligned} \tag{XIII.138}$$

y usamos (XIII.89) para simplificar, lo que conduce a

$$\left\langle\frac{1}{\rho_{\rm at}}\right\rangle = \frac{Z}{n^2}. \tag{XIII.139}$$

Para calcular $\langle r^{-s}\rangle$, $s = 1, 2, 3, \ldots$ de manera directa pero más sistemática, se puede proceder como sigue. La expresión

$$\left\langle\frac{1}{r^s}\right\rangle = \int_0^\infty r^{2-s}R_{nl}^2\,dr = \frac{1}{(2\alpha)^{3-s}}\int_0^\infty \rho^{2-s}R_{nl}^2\,(\rho)d\rho$$

se reescribe utilizando (XIII.83), como

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{1}{r^s} \right\rangle &= \frac{C_{nl}^2}{(2\alpha)^{3-s}} \int_0^\infty \rho^{2-s+2l} e^{-\rho} \left[Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \right]^2 d\rho \\ &= \frac{C_{nl}^2}{(2\alpha)^{3-s}} \int_0^\infty \rho^{m+1-s} e^{-\rho} \left[Q_k^m(\rho) \right]^2 d\rho, \end{aligned} \tag{XIII.140}$$

donde se puso $k = n-l-1$, $m = 2l+1$. Si ahora se expresa uno de los polinomios $Q_k^m(\rho)$ de manera explícita en forma de serie de potencias,

$$Q_k^m(\rho) = \sum_{j=0}^{k} \frac{(-1)^j (k+m)!}{j!\,(k-j)!\,(m+j)!} \rho^j,$$

mientras el otro se escribe con ayuda de la correspondiente fórmula de Rodrigues como

$$Q_k^m(\rho) = \frac{1}{k!} e^\rho \rho^{-m} \frac{d^k}{d\rho^k} \left(e^{-\rho} \rho^{k+m} \right),$$

se obtiene

$$\left\langle \frac{1}{r^s} \right\rangle = \frac{C_{nl}^2}{(2\alpha)^{3-s}} \frac{1}{k!} \sum_{j=0}^{k} \frac{(-1)^j (k+m)!}{j!\,(k-j)!\,(m+j)!} \int_0^\infty \rho^{1-s+j} \frac{d^k}{d\rho^k} \left(e^{-\rho} \rho^{k+m} \right) d\rho. \tag{XIII.141}$$

Esta integral se resuelve por partes sin problemas, pero deben distinguirse las siguientes posibilidades:

a) Si $1 - s + j < 0$, la integral es no nula para todo valor de k.

b) Si $1 - s + j > 0$, la integral es no nula sólo cuando $1 - s + j \geq k$.

Para $s = 2$, $1 - s + j = j - 1$, y si $j - 1 > 0$, la integral sólo contribuye para $j - 1 \geq k$, condición que no puede satisfacerse, pues el máximo valor que toma j es precisamente k. Por lo tanto, el único término que contribuye en la expresión (XIII.141) para $s = 2$ es el correspondiente a $j - 1 < 0$, es decir $j = 0$. Se obtiene así

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{C_{nl}^2}{2\alpha} \frac{1}{(k!)^2} \frac{(k+m)!}{m!} \int_0^\infty \rho^{-1} \frac{d^k}{d\rho^k} \left(e^{-\rho} \rho^{k+m} \right) d\rho. \tag{XIII.142}$$

Integrando por partes k veces,

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle &= \frac{C_{nl}^2}{2\alpha} \frac{1}{(k!)^2} \frac{(k+m)!}{m!} k! \int_0^\infty \rho^{m-1} e^{-\rho} \, d\rho \\ &= \frac{C_{nl}^2}{2\alpha} \frac{(k+m)!}{k!} \frac{(m-1)!}{m!} = \frac{C_{nl}^2}{2\alpha} \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!\,(2l+1)}. \end{aligned}$$

Sustituyendo el valor del coeficiente de normalización se llega finalmente a

$$\left\langle \frac{1}{\rho_{\text{at}}^2} \right\rangle = \left\langle \frac{a_0^2}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{n^3} \frac{1}{l + \frac{1}{2}}. \tag{XIII.143}$$

En el caso $s = 3$ se tiene que $1 - s + j = j - 2$, y de nuevo, si $j - 2 > 0$, debe cumplirse que $j - 2 \geq k$, condición que no se satisface, pues el máximo

valor posible de j es precisamente k. Así pues, las contribuciones posibles se dan cuando $j-2<0$, lo que significa que en la expresión (XIII.141) sólo contribuyen los términos que corresponden a $j=0$ e $j=1$. De aquí que

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle &= \frac{C_{nl}^2}{k!}\left[\frac{(k+m)!}{k!m!}\int_0^\infty \rho^{-2}\frac{d^k}{d\rho^k}\left(e^{-\rho}\rho^{k+m}\right)\,d\rho\right.\\ &\quad\left.-\frac{(k+m)!}{(k-1)!\,(m+1)!}\int_0^\infty \rho^{-1}\frac{d^k}{d\rho^k}\left(e^{-\rho}\rho^{k+m}\right)\,d\rho\right].\end{aligned}$$

Integrando por partes k veces,

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle &= \frac{C_{nl}^2}{k!}\left[\frac{(k+m)!\,(k+1)!}{k!m!}\int_0^\infty \rho^{m-2}e^{-\rho}\,d\rho\right.\\ &\quad\left.-\frac{(k+m)!k!}{(k-1)!\,(m+1)!}\int_0^\infty \rho^{m-1}e^{-\rho}\,d\rho\right]\\ &= \frac{C_{nl}^2}{k!}\left[\frac{(k+m)!\,(m-2)!}{m!}\,(k+1)-\frac{(k+m)!\,(m-1)!}{(m+1)!}k\right]\\ &= C_{nl}^2\frac{(k+m)!}{k!m}\left[\frac{2k+m+1}{(m+1)\,(m-1)}\right]=C_{nl}^2\frac{(n+l)!n}{(n-l-1)!2l\,(l+1)\,(2l+1)}.\end{aligned}$$

Sustituyendo la expresión para C_{nl}^2 se obtiene finalmente

$$\left\langle \frac{1}{\rho_{at}^3} \right\rangle = \left\langle \frac{a_0^3}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{n^3}\frac{1}{l\,(l+1)\left(l+\frac{1}{2}\right)}. \tag{XIII.144}$$

Una manera alternativa de derivar el valor de $\langle r^{-2}\rangle$ se construye con ayuda de la fórmula de Feynman-Hellman. Esta fórmula se discute en la subsección 14.6.3 del texto, y está dada por la ecuación (T14.132)

$$\frac{\partial f_n}{\partial\lambda} = \langle\psi_n(\lambda)|\,\frac{\partial\hat{F}}{\partial\lambda}\,|\psi_n(\lambda)\rangle\,, \tag{XIII.145}$$

donde $\hat{F}$ es un operador que depende de un parámetro λ, y f_n es su valor esperado en el estado n. Para usar el teorema consideramos un hamiltoniano central generalizado de la forma[5]

$$\hat{h}(\lambda) = \frac{1}{2m_0}\hat{p}_r^2 + V(r) + \frac{\hbar^2\lambda(\lambda+1)}{2m_0r^2}. \tag{XIII.146}$$

Los valores propios $E_n(\lambda)$ de este hamiltoniano corresponden a los valores físicos de la energía para $\lambda = l =$ entero. Aplicando el teorema de Feynman-Hellman se obtiene

$$\langle n\lambda|\,\frac{\partial\hat{h}}{\partial\lambda}\,|n\lambda\rangle = \frac{\hbar^2(2\lambda+1)}{2m_0}\,\langle n\lambda|\,\frac{1}{r^2}\,|n\lambda\rangle = \frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial\lambda},$$

es decir,

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[\frac{1}{(2\lambda+1)}\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial\lambda}\right]_{\lambda=l}. \tag{XIII.147}$$

Aplicada al átomo hidrogenoide con $E_{kl} = -(m_0Z^2e^4/2\hbar^2)(k+l+1)^{-2}$, esta fórmula reproduce la ecuación (XIII.143); para el oscilador armónico isotrópico

[5]El procedimiento está tomado de J.-M. Lévy-Leblond, *Am. J. Phys.* **55** (1987) 146.

los niveles de energía son $E_{kl} = \hbar\omega\left(2k + l + \frac{3}{2}\right)$, y (XIII.147) da el interesante resultado

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{2m_0\omega}{\hbar(2l+1)}. \tag{XIII.148}$$

Como $\langle r^2 \rangle = E_{kl}/m_0\omega^2$, el resultado puede escribirse en forma similar a (XIII.143):

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \langle r^2 \rangle = \frac{2k + l + \frac{3}{2}}{l + \frac{1}{2}} = \frac{n}{l + \frac{1}{2}}. \tag{XIII.149}$$

XIII.14 Demuestre directamente la siguiente relación de recurrencia para los valores esperados de ρ^n hidrogenoides, llamada relación de Kramers (cf. problema ilustrativo 13.3 del texto):

$$\frac{4}{Z^2}(s+1)\langle \rho^s \rangle - \frac{2n}{Z}(2s+1)\langle \rho^{s-1} \rangle + \frac{s}{4}\left[(2l+1)^2 - s^2\right]\langle \rho^{s-2} \rangle = 0.$$

El teorema del virial generalizado (discutido en el problema ilustrativo 9.1 del texto), aplicado a estados estacionarios de sistemas ligados, establece que para toda variable $\hat{A}$ independiente del tiempo se cumple $\left\langle \overset{\wedge}{\dot{A}} \right\rangle = 0$, es decir,

$$\left\langle \left[\hat{A}, \hat{H}\right] \right\rangle = 0. \tag{XIII.150}$$

Aplicamos este principio al operador $\hat{A} = \hat{p}_r r^{s+1} = \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{r} r^s$, donde $\hat{p}_r \equiv -i\hbar\partial/\partial r$, por lo que se trata de un operador *diferente* al discutido en los problemas XII.6 y XII.7. Se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle \hat{p}_r r^{s+1} \rangle &= \left\langle \overset{\wedge}{\dot{p}}_r\, r^{s+1} \right\rangle + \langle \hat{p}_r \dot{r} r^s \rangle + \cdots + \langle \hat{p}_r r^s \dot{r} \rangle \\ &= \left\langle \overset{\wedge}{\dot{p}}_r\, r^{s+1} \right\rangle + \sum_{n=0}^{s} \langle \hat{p}_r r^n \dot{r} r^{s-n} \rangle = 0. \end{aligned}$$

Para simplificar, escribimos $\dot{r} = \hat{p}_r/m$:

$$\left\langle \overset{\wedge}{\dot{p}}_r\, r^{s+1} \right\rangle + \frac{1}{m}\sum_{n=0}^{s} \langle \hat{p}_r r^n \hat{p}_r r^{s-n} \rangle = 0. \tag{XIII.151}$$

La relación de conmutación

$$[r^n, \hat{p}_r] = i\hbar n r^{n-1}$$

permite pasar todos los operadores de momento a la izquierda, para obtener

$$\left\langle \overset{\wedge}{\dot{p}}_r\, r^{s+1} \right\rangle + \frac{1}{m}\sum_{n=0}^{s} \left[\langle \hat{p}_r^2 r^s \rangle + i\hbar n \langle \hat{p}_r r^{s-1} \rangle\right] = 0,$$

es decir,

$$\left\langle \overset{\wedge}{\dot{p}}_r\, r^{s+1} \right\rangle + \frac{s+1}{m}\langle \hat{p}_r^2 r^s \rangle + \frac{i\hbar}{m}\frac{s(s+1)}{2}\langle \hat{p}_r r^{s-1} \rangle = 0. \tag{XIII.152}$$

Por otra parte, el mismo teorema del virial generalizado implica también que

$$\frac{d}{dt}\left\langle r^s\right\rangle = 0,$$

por lo que, procediendo en forma análoga a como hicimos para obtener el resultado anterior, se obtiene sucesivamente

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\left\langle r^s\right\rangle &= \left\langle \dot{r}r^{s-1}\right\rangle + \left\langle r\dot{r}r^{s-2}\right\rangle + \cdots + \left\langle r^{s-1}\dot{r}\right\rangle \\ &= \frac{1}{m}\sum_{n=1}^{s}\left\langle r^{n-1}\hat{p}_r r^{s-n}\right\rangle = \frac{1}{m}\sum_{n=1}^{s}\left[\left\langle \hat{p}_r r^{s-1}\right\rangle + i\hbar\left(n-1\right)\left\langle r^{s-2}\right\rangle\right] \\ &= \frac{s}{m}\left\langle \hat{p}_r r^{s-1}\right\rangle + i\hbar\frac{s\left(s+1\right)}{2m}\left\langle r^{s-2}\right\rangle - \frac{i\hbar}{m}s\left\langle r^{s-2}\right\rangle = 0.\end{aligned}$$

Simplificando, queda finalmente

$$\left\langle \hat{p}_r r^{s-1}\right\rangle = -\frac{i\hbar}{2}\left(s-1\right)\left\langle r^{s-2}\right\rangle. \tag{XIII.153}$$

Sustituyendo esta expresión en (XIII.152) se obtiene

$$\left\langle \hat{p}_r\, r^{s+1}\right\rangle + \frac{s+1}{m}\left\langle \hat{p}_r^2 r^s\right\rangle + \frac{\hbar^2}{4m}s\left(s^2-1\right)\left\langle r^{s-2}\right\rangle = 0. \tag{XIII.154}$$

Para simplificar los dos primeros términos utilizamos el hamiltoniano del sistema, que en el presente caso es el del átomo hidrogenoide, el cual puede escribirse en la forma (T13.41)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l\left(l+1\right)}{2mr^2} - \frac{C}{r}, \tag{XIII.155}$$

donde $C = Ze^2$ y la función de onda es $u = rR$, ecuación (T13.23). Partimos de la ecuación de movimiento

$$\hat{p}_r = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{p}_r, \hat{H}\right] = -\frac{i\hbar l\left(l+1\right)}{2mr^2}\left[\hat{p}_r, \frac{1}{r^2}\right] + \frac{iC}{\hbar}\left[\hat{p}_r, \frac{1}{r}\right]. \tag{XIII.156}$$

Como

$$\left[\hat{p}_r, f\left(r\right)\right] = -i\hbar\frac{\partial f}{\partial r}, \tag{XIII.157}$$

sigue que

$$\left[\hat{p}_r, \frac{1}{r}\right] = \frac{i\hbar}{r^2}, \quad \left[\hat{p}_r, \frac{1}{r^2}\right] = \frac{2i\hbar}{r^3}, \tag{XIII.158}$$

lo que sustituido en (XIII.156) da

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar^2 l\left(l+1\right)}{mr^3} - \frac{C}{r^2}. \tag{XIII.159}$$

Para el cálculo de valores esperados sobre estados propios del hamiltoniano puede sustituirse E por $\hat{H}$, lo que con ayuda de (XIII.155) da una expresión para $\hat{p}_r^2$ en términos de r:

$$\hat{p}_r^2 = 2m\left[E - \frac{\hbar^2 l\left(l+1\right)}{2mr^2} + \frac{C}{r}\right]. \tag{XIII.160}$$

Finalmente, insertando estos dos últimos resultados en (XIII.154) se obtiene la siguiente relación de recurrencia para el átomo hidrogenoide, conocida como *fórmula de Kramers:*

$$2E\,(s+1)\,\langle r^s\rangle + C\,(2s+1)\,\langle r^{s-1}\rangle + \frac{\hbar^2}{m}s\left[\frac{s^2-1}{4} - l\,(l+1)\right]\langle r^{s-2}\rangle = 0, \tag{XIII.161}$$

donde

$$C = Ze^2, \quad E = -\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

En términos de la variable adimensional

$$\rho = \frac{Z^2}{2na_0}r \tag{XIII.162}$$

la fórmula de Kramers se reduce a

$$\frac{4}{Z^2}\,(s+1)\,\langle\rho^s\rangle - \frac{2n}{Z}\,(2s+1)\,\langle\rho^{s-1}\rangle + \frac{s}{4}\left[(2l+1)^2 - s^2\right]\langle\rho^{s-2}\rangle = 0. \tag{XIII.163}$$

XIII.15 Derive la relación de recurrencia para $\langle r^s\rangle$ para el potencial $V = qr^n$. Verifique que los resultados del problema ilustrativo 13.3 del texto son casos particulares de esta expresión.

En el problema ilustrativo 13.3 del texto y en el problema anterior se deriva la siguiente relación entre valores esperados sobre estados estacionarios, que es un caso particular del teorema del virial generalizado:

$$\left\langle \overset{\wedge}{\dot{p}}_r\, r^{s+1}\right\rangle + \frac{s+1}{m}\,\langle\hat{p}_r^2 r^s\rangle + s\left(s^2-1\right)\frac{\hbar^2}{4m}\,\langle r^{s-2}\rangle = 0. \tag{XIII.164}$$

Cuando el hamiltoniano es de la forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l\,(l+1)}{2mr^2} + qr^n, \tag{XIII.165}$$

se tiene

$$\overset{\wedge}{\dot{p}}_r = \frac{\hbar^2 l\,(l+1)}{mr^3} + q\,[\hat{p}_r, r^n] = \frac{\hbar^2 l\,(l+1)}{mr^3} - nr^{n-1}q, \tag{XIII.166}$$

además de que $\hat{p}_r^2$ se puede escribir como

$$\hat{p}_r^2 = 2m\left[E - \frac{\hbar^2 l\,(l+1)}{2mr^2} - qr^n\right].$$

Sustituyendo estas dos expresiones en la ecuación (XIII.164) se obtiene la relación de recurrencia para problemas centrales:

$$-q\,(n+2s+2)\,\langle r^{n+s}\rangle + 2E\,(s+1)\,\langle r^s\rangle + \frac{\hbar^2}{m}s\left(\frac{s^2-1}{4} - l\,(l+1)\right)\langle r^{s-2}\rangle = 0. \tag{XIII.167}$$

Con $q = -C$, $n = -1$ se recupera la ecuación (1) del problema ilustrativo 13.3 del texto para el átomo hidrogenoide; si se toma $q = \frac{1}{2}m\omega^2$ y $n = 2$, se recupera la ecuación (2) del mismo problema para el oscilador armónico. Más en general,

reinsertando la expresión $V = qr^n$ esta relación de recurrencia se puede reescribir en la forma

$$2E\,(s+1)\,\langle r^s\rangle - 2\,(s+1)\,\langle Vr^s\rangle - \left\langle V' r^{s+1}\right\rangle + \frac{\hbar^2}{4m} s\left[s^2 - 4\left(l+\frac{1}{2}\right)^2\right]\left\langle r^{s-2}\right\rangle = 0. \tag{XIII.168}$$

XIII.16 Demuestre que en el estado base del átomo hidrogenoide el valor esperado de r^n es

$$\langle 100 \mid r^n \mid 100\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{a_0}{2Z}\right)^n (n+2)!$$

La función de onda radial del estado base hidrogenoide es

$$R_{10}(\rho) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\rho/2} Q_0^1(\rho) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\rho/2}. \tag{XIII.169}$$

Con $\rho = 2\alpha r$ se obtiene

$$\begin{aligned}\langle 100 \mid r^n \mid 100\rangle &= 4\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{1}{(2\alpha)^{n+3}} \int_0^\infty \rho^{2+n} e^{-\rho}\, d\rho \\ &= 4\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{1}{(2\alpha)^{n+3}} (n+2)!\end{aligned}$$

Introduciendo la relación $\alpha = Z/a_0$ (válida para el estado base) se llega al resultado solicitado:

$$\langle 100 \mid r^n \mid 100\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{a_0}{2Z}\right)^n (n+2)! \tag{XIII.170}$$

XIII.17 Resuelva el problema del átomo de hidrógeno con un potencial adicional γ/r^2 y muestre que para cualquier valor del parámetro $\gamma \neq 0$, se rompe la degeneración respecto de l.

Es posible extraer algunas conclusiones generales para γ arbitraria sin necesidad de obtener previamente la solución del problema. Procediendo exactamente como se hizo con el problema del átomo hidrogenoide, se recupera la ecuación (T13.46), pero con un término adicional:

$$Q'' + \left(2\frac{l+1}{\rho} - 1\right) Q' + \left(\frac{n-l-1}{\rho} + \frac{4\alpha^2\gamma}{\rho^2}\right) Q = 0. \tag{XIII.171}$$

La aparición de este término es esencial, pues los niveles de energía pasan a depender explícitamente de la pareja de parámetros γ y $n-l-1$, lo que rompe la degeneración en l. En otras palabras, esta degeneración se puede ver como consecuencia del hecho de que, al pasar de la ecuación diferencial (T13.43) para la función radial u,

$$u'' + \left(-\frac{1}{4} + \frac{Z}{\alpha a_0}\frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) u = 0, \tag{XIII.172}$$

a la ecuación (T13.46) (la (XIII.171) con $\gamma = 0$) para $u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho/2} Q(\rho)$, el coeficiente del último término ($\sim 1/\rho^2$) se anula idénticamente; como esto deja de ser cierto si $\gamma \neq 0$, según sigue de (XIII.171), se rompe esta degeneración.

La solución explícita se puede obtener observando que el potencial efectivo al que está sujeto el electrón es, con $\beta = 2m_0\gamma/\hbar^2$,

$$\begin{aligned} V(r) &= -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{l(l+1)+\beta}{r^2} \\ &= -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\lambda(\lambda+1)}{r^2}, \end{aligned} \tag{XIII.173}$$

donde la nueva constante λ está determinada (para $\beta > 0$) por la ecuación

$$\lambda(\lambda+1) = l(l+1)+\beta \Rightarrow \lambda = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 + \beta}. \tag{XIII.174}$$

A partir de esta identificación el problema se resuelve de manera usual, pero con λ en el papel que antes jugaba l.[6]

Una manera simple de tratar este problema consiste en usar la teoría de perturbaciones, tomando al potencial γ/r^2 como una perturbación aplicada al átomo hidrogenoide. Se comprueba que la presencia de esta perturbación rompe la degeneración en l, por pequeño que sea el valor del parámetro γ, tal como sucedió arriba.

XIII.18 En la electrodinámica clásica el momento magnético μ_z producido por una densidad de corriente eléctrica $\mathbf{j}_{\text{el}}$ está dado por

$$\mu_z = \frac{1}{2c}\int (\mathbf{r}\times\mathbf{j}_{\text{el}})_z \, d^3x.$$

Demuestre que para cargas discretas esta expresión se reduce a

$$\mu_z = \frac{q}{2m_0c}L_z$$

y, trasladando este resultado al caso cuántico, demuestre que $\langle\hat{\mu}_z\rangle = e\left\langle\hat{L}_z\right\rangle/2m_ec = (e\hbar/2m_ec)\,m$ si la función de onda tiene la forma $\psi = \Phi(r,\theta)\,e^{im\varphi}$, con Φ una función real.

Para una distribución continua de cargas la densidad de corriente es

$$\mathbf{j}_{\text{el}} = \int \rho_{\text{el}}(\mathbf{x})\mathbf{v}(\mathbf{x})d^3x. \tag{XIII.175}$$

Cuando la corriente es generada por un conjunto discreto de cargas puntuales, esta expresión toma la forma

$$\mathbf{j}_{\text{el}} = \sum_n q_n\mathbf{v}_n = \sum_n \frac{q_n}{m_n}\mathbf{p}_n. \tag{XIII.176}$$

Para partículas iguales de esta expresión sigue que

$$\begin{aligned} \mu_z &= \frac{1}{2c}\int (\mathbf{r}\times\mathbf{j}_{\text{el}})_z \, d^3x \\ &= \frac{q}{2m_0c}\int \sum_n (\mathbf{r}\times\mathbf{p}_n)_z \, d^3x = \frac{q}{2m_0c}\int \sum_n (\mathbf{L}_n)_z \, d^3x, \end{aligned}$$

[6] La solución explícita de este problema se puede ver en Landau y Lifshitz (1965), §35.

donde $\mathbf{L}_n = \mathbf{r} \times \mathbf{p}_n$ es el momento angular de la partícula n. En términos del momento angular total, $\mathbf{L} = \sum_n \mathbf{L}_n$, se obtiene

$$\mu_z = \frac{q}{2m_0 c} L_z. \tag{XIII.177}$$

Debido a la linealidad de esta expresión, se le puede transcribir directamente a términos cuánticos, con $m_0 \to m_e, q \to e = -e_0$ para la masa y la carga del electrón, respectivamente. Queda

$$\hat{\mu}_z = \frac{e}{2m_e c} \hat{L}_z = -\mu_0 \frac{\hat{L}_z}{\hbar}, \tag{XIII.178}$$

donde

$$\mu_0 = e_0 \hbar / 2m_e c \tag{XIII.179}$$

es el *magnetón de Bohr*. Éste es precisamente el resultado que se obtiene de una aplicación directa de la ecuación de Schrödinger al caso de una partícula inmersa en un campo magnético, como se ve en la sección 13.5 del texto, ecuación (T13.78). Puede considerarse que esta coincidencia verifica la validez de la transición de la ecuación (XIII.177) a la (XIII.178). El mismo resultado se reobtiene en el siguiente problema, pero empleando un procedimiento cuántico sistemático. Obsérvese que la ecuación (XIII.178) predice para la relación giromagnética orbital del electrón el valor $e/2m_e c = -\mu_0/\hbar$, que coincide con la correspondiente relación clásica.

Consideremos ahora el valor esperado de $\hat{\mu}_z$ calculado sobre un estado de la forma $\Phi(r, \theta)\, e^{im\varphi}$. Se verifica inmediatamente que se trata de un estado propio de la proyección del momento angular orbital sobre el eje Oz, pues de la ecuación (T12.38),

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \tag{XIII.180}$$

aplicada a $\psi = \Phi(r, \theta)\, e^{im\varphi}$ se obtiene $\hat{L}_z \psi = m\hbar\psi$. Luego para estos estados se tiene que

$$\mu_z \equiv \langle \hat{\mu}_z \rangle = \frac{e\hbar}{2m_e c} m = -\mu_0 m. \tag{XIII.181}$$

XIII.19 Muestre que cuando se toman en cuenta los efectos cuadráticos del campo magnético, el momento magnético de un átomo es

$$\mu = -\mu_0 m - \frac{e^2 B}{6m_e c^2} \langle r^2 \rangle .$$

Comentarios: El primer término representa un momento magnético permanente (independiente del campo externo) y puede tomar cualquier signo; ésta es la *componente paramagnética* del momento magnético. El segundo término (que por venir de un efecto cuadrático es en general muy pequeño para campos pequeños) representa un momento magnético inducido (se anula con $B = 0$), es siempre negativo y existe para todos los átomos; éste es el *momento diamagnético*. (Veáse el problema ilustrativo 15.1 del texto.)

El hamiltoniano del átomo en presencia de un campo electromagnético se obtiene usando el *principio de acoplamiento minimal*[7] aplicado al correspondiente hamiltoniano en ausencia del campo, como se discute en la sección 13.5 del

[7] El neologismo *minimal* se refiere (de manera análoga a como se hace en el texto) a una teoría construida con un mínimo de elementos, es decir, *estructuralmente mínima*; de ninguna manera califica al valor arrojado por la teoría, como lo haría el término *mínimo*.

texto. Con esta regla se obtiene

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m_e}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + e\Phi \\ &= \hat{H}_0 - \frac{e}{2m_e c}\left(\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A}\right) + \frac{e^2}{2m_e c^2}\mathbf{A}^2, \end{aligned} \tag{XIII.182}$$

donde

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + e\Phi \tag{XIII.183}$$

es el hamiltoniano en ausencia de campo magnético (pero en presencia del potencial Φ).

Consideremos el caso de campo magnético constante y homogéneo, de intensidad B; en este caso se puede escribir el potencial vectorial en la forma particular dada por la ecuación (T13.74),

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{r}, \tag{XIII.184}$$

pues se cumple idénticamente que

$$\mathbf{B} = \nabla\times\mathbf{A}. \tag{XIII.185}$$

Como además $\nabla\cdot\mathbf{A} = 0$, se tiene que con esta selección $\hat{\mathbf{p}}$ y $\mathbf{A}$ conmutan,

$$\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A} = -i\hbar\left(\nabla\cdot\mathbf{A}\right) + \mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} \tag{XIII.186}$$

y el hamiltoniano se simplifica, obteniéndose

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{m_e c}\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2m_e c^2}\mathbf{A}^2. \tag{XIII.187}$$

Elegimos un sistema de coordenadas con el eje Oz orientado a lo largo del campo magnético, con lo que se obtiene

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2}\left(-\hat{\mathbf{i}}y + \hat{\mathbf{j}}x\right) \tag{XIII.188}$$

y

$$\mathbf{A}^2 = \frac{B^2}{4}\left(x^2 + y^2\right). \tag{XIII.189}$$

Otra ventaja importante de escribir $\mathbf{A}$ como lo hemos hecho, es que conduce al siguiente resultado, que es muy útil:

$$\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}\left(\mathbf{B}\times\mathbf{r}\right)\cdot\hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}\mathbf{B}\cdot\left(\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{p}}\right) = \frac{1}{2}\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{L}}. \tag{XIII.190}$$

Con estas expresiones el hamiltoniano (XIII.187) toma la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{2m_e c}\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{L}} + \frac{e^2B^2}{8m_e c^2}\left(x^2 + y^2\right). \tag{XIII.191}$$

Consideraremos el caso en que en ausencia de $\mathbf{A}$ el sistema posee simetría esférica, de tal forma que $\langle x^2\rangle = \langle y^2\rangle = \langle z^2\rangle$, por lo que

$$\langle x^2 + y^2\rangle = \frac{2}{3}\langle r^2\rangle. \tag{XIII.192}$$

De (XIII.191) sigue que

$$E = \left\langle \hat{H}_0 \right\rangle - \frac{e}{2m_e c} \left\langle \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\rangle + \frac{e^2 B^2}{12 m_e c^2} \left\langle r^2 \right\rangle . \tag{XIII.193}$$

El momento magnético se define en general como

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{B}}. \tag{XIII.194}$$

Aplicando esta definición a la energía (XIII.193) se obtiene

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2m_e c} \left\langle \hat{\mathbf{L}} \right\rangle - \frac{e^2}{6m_e c^2} \mathbf{B} \left\langle r^2 \right\rangle , \tag{XIII.195}$$

resultado que sugiere definir el correspondiente operador como

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{e}{2m_e c} \hat{\mathbf{L}} - \frac{e^2}{6m_e c^2} \mathbf{B} r^2. \tag{XIII.196}$$

Para estados propios de $\hat{L}_z$ con eigenvalor $\hbar m$ se puede escribir, en particular,

$$\mu_z = -\mu_0 m - \frac{e^2}{6m_e c^2} B \left\langle r^2 \right\rangle , \tag{XIII.197}$$

donde se introdujo la definición (XIII.179) del magnetón de Bohr.

De la última expresión sigue que la susceptibilidad diamagnética (por átomo-gramo) está dada por

$$\chi_{z\text{diamag}} = N \frac{\partial \mu_z^{\text{diamag}}}{\partial B} = -\frac{e^2 N}{6m_e c^2} \left\langle r^2 \right\rangle , \tag{XIII.198}$$

donde N es el número de Avogadro. Este valor resulta diferente de cero (y negativo) en todos los casos; sin embargo, las propiedades diamagnéticas de los materiales descritas por esta expresión son frecuentemente encubiertas por el paramagnetismo, cuando lo hay, que resulta dominante.

XIII.20 Muestre que el valor medio del campo magnético en una dirección Oz debido al movimiento orbital del electrón de un átomo de hidrógeno se puede estimar como

$$\langle B_z \rangle = -2\mu_0 \left(\frac{m_e e^2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{m}{n^3 l \left(l+1\right) \left(l+\frac{1}{2}\right)}.$$

Muestre que para el estado $2p$, $\langle B_z \rangle \sim 10^4$ gauss.

En una descripción clásica el campo magnético generado por el electrón en movimiento en un campo central es

$$\mathbf{B} = \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{E}. \tag{XIII.199}$$

Como la fuerza está dada aproximadamente por

$$\mathbf{F} = -e\mathbf{E} = -\frac{\mathbf{r}}{r} \frac{dV}{dr}, \tag{XIII.200}$$

se puede reescribir

$$\mathbf{B} = \frac{1}{ec}\left(\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right)\mathbf{v}\times\mathbf{r} = -\frac{1}{em_ec}\left(\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right)\mathbf{L}. \tag{XIII.201}$$

Para obtener una versión cuántica de este resultado partimos de la ecuación (T12.12),

$$[\hat{\mathbf{L}}, f(\mathbf{r})] = -i\hbar\mathbf{r}\times\nabla f, \tag{XIII.202}$$

de la que sigue que $\left[\hat{\mathbf{L}}, f(r)\right] = 0$. Debido a esto en (XIII.201) no aparece ningún problema de ordenamiento al pasar al caso cuántico, y podemos escribir, cuando se promedia sobre estados propios del momento angular,

$$\langle B_z\rangle = -\frac{1}{em_ec}\left\langle\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\hat{L}_z\right\rangle = -\frac{\hbar}{em_ec}\left\langle\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right\rangle m. \tag{XIII.203}$$

En particular, para el átomo de hidrógeno

$$\frac{dV}{dr} = \frac{e^2}{r^2}$$

y resulta

$$\langle B_z\rangle = -\frac{\hbar e}{m_ec}\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle m. \tag{XIII.204}$$

Con $\langle r^{-3}\rangle$ tomada del problema XIII.13, queda finalmente

$$\langle B_z\rangle = -2\mu_0\left(\frac{m_ee^2}{\hbar^2}\right)^3\frac{m}{n^3l\,(l+1)\left(l+\frac{1}{2}\right)}. \tag{XIII.205}$$

Para evaluar el orden de magnitud de estos campos medios, consideremos el estado hidrogenoide $2p$ con números cuánticos $n=2$, $l=1$ y $m=1$. Se obtiene en este caso

$$\langle B_z\rangle = -\frac{\mu_0}{12a_0^3} \simeq 0.52\times10^4\text{gauss} = 0.52\text{ tesla},$$

donde se tomó $a_0 \simeq 5.3\times10^{-9}$cm y $\mu_0 \simeq 9.3\times10^{-21}$gauss·cm^3.

XIII.21 Derive detalladamente las ecuaciones (T13.60) y (T13.61).

Se deben determinar los coeficientes de Einstein para las transiciones espontáneas permitidas en el átomo de hidrógeno, tomando en cuenta la regla de selección $\Delta l = \pm1$ obtenida en el problema XIII.6. Los elementos de matriz de interés son

$$\left\langle n'l'm' \mid \mathbf{r}\mid nlm\right\rangle = \left\langle n'l' \mid r|nl\right\rangle\left\langle l'm' \mid \hat{\mathbf{a}}_r|lm\right\rangle, \tag{XIII.206}$$

donde el factor angular se obtuvo en el problema XIII.6, y es [ecuaciones (T13.31) y (XIII.63)-(XIII.68)]:

$$\begin{aligned}\left\langle l'm' \mid \hat{\mathbf{a}}_r|lm\right\rangle &= \hat{\mathbf{a}}_+\left(A^+_{lm}\delta_{l',l+1} + B^+_{lm}\delta_{l',l-1}\right)\delta_{m',m+1}\\ &\quad + \hat{\mathbf{a}}_-\left(A^-_{lm}\delta_{l',l+1} + B^-_{lm}\delta_{l',l-1}\right)\delta_{m',m-1}\\ &\quad + \hat{\mathbf{a}}_z\left(A_{lm}\delta_{l',l+1} + B_{lm}\delta_{l',l-1}\right)\delta_{m',m}.\end{aligned} \tag{XIII.207}$$

Consideremos primero las transiciones de l a $l' = l+1$, para las que se tiene

$$\left\langle l+1, m' \mid \hat{\mathbf{a}}_r|lm\right\rangle = \hat{\mathbf{a}}_+A^+_{lm}\delta_{m',m+1} + \hat{\mathbf{a}}_-A^-_{lm}\delta_{m',m-1} + \hat{\mathbf{a}}_zA_{lm}\delta_{m',m}. \tag{XIII.208}$$

Cada una de las tres componentes de este resultado contribuye a transiciones con diferente m'; se obtiene, sumando las contribuciones,

$$\begin{aligned}|\langle l+1,m+1 \mid \hat{\mathbf{a}}_r|lm\rangle + \langle l+1,m-1 \mid \hat{\mathbf{a}}_r|lm\rangle + \langle l+1,m \mid \hat{\mathbf{a}}_r|lm\rangle|^2 \\ = \frac{1}{2}\left(A^+_{lm}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(A^-_{lm}\right)^2 + \left(A_{lm}\right)^2, \quad \text{(XIII.209)}\end{aligned}$$

donde se ha tomado en cuenta que de las definiciones (T13.30) o las ecuaciones (XIII.65) sigue

$$\hat{\mathbf{a}}^2_\pm = \frac{1}{2}, \qquad \hat{\mathbf{a}}^2_z = 1. \tag{XIII.210}$$

Este resultado, combinado con los apropiados del problema XIII.6 y la expresión (T9.98), da para la probabilidad de decaimiento del estado (n,l,m) al estado $(n,l+1,m')$, para todas las m' permitidas,

$$\begin{aligned}A_{nlm\to n',l+1,\,m'} &= \frac{4e^2\omega^3_{nn'}}{3\hbar c^3}\left|\langle n',l+1 \mid r \mid nl\rangle\right|^2\left[\frac{1}{2}\left(A^+_{lm}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(A^-_{lm}\right)^2 + \left(A_{lm}\right)^2\right] \\ &= \frac{4e^2\omega^3_{nn'}}{3\hbar c^3}\frac{l+1}{2l+1}\left|\langle n',l+1 \mid r \mid nl\rangle\right|^2. \quad \text{(XIII.211)}\end{aligned}$$

Esta es la ecuación (T13.60) que se solicita derivar.

Consideramos ahora las transiciones $(nlm) \to (n',l-1,m')$, para las cuales tenemos

$$\langle l-1,m' \mid \hat{\mathbf{a}}_r|lm\rangle = \hat{\mathbf{a}}_+ B^+_{lm}\delta_{m',m+1} + \hat{\mathbf{a}}_- B^-_{lm}\delta_{m',m-1} + \hat{\mathbf{a}}_z B_{lm}\delta_{m',m}. \tag{XIII.212}$$

La probabilidad de transición resulta

$$\begin{aligned}|\langle l-1,m+1 \mid \hat{\mathbf{a}}_r|lm\rangle + \langle l-1,m-1 \mid \hat{\mathbf{a}}_r|lm\rangle + \langle l-1,m \mid \hat{\mathbf{a}}_r|lm\rangle|^2 \\ = \frac{1}{2}\left(B^+_{lm}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(B^-_{lm}\right)^2 + \left(B_{lm}\right)^2 = \frac{l}{2l-1}. \quad \text{(XIII.213)}\end{aligned}$$

Así pues,

$$A_{nlm\to n',l-1,\text{toda }m'} = \frac{4e^2\omega^3_{nn'}}{3\hbar c^3}\frac{l}{2l-1}\left|\langle n',l-1 \mid r \mid nl\rangle\right|^2, \tag{XIII.214}$$

que es la ecuación (T13.61) solicitada.

XIII.22 Calcule la vida media del estado $3s$ hidrogenoide.

El estado hidrogenoide $3s$ puede decaer espontáneamente sólo al estado $2p$, pues la transición al estado base $1s$ le está prohibida. Tratándose de una transición $l \to l+1$ (con $l=0$) debemos aplicar la fórmula (XIII.211) para determinar la probabilidad de transición, lo que da

$$A_{3s\to 2p} = \frac{4e^2\omega^3_{32}}{3\hbar c^3}\left|\langle 2\,1 \mid r \mid 3\,0\rangle\right|^2. \tag{XIII.215}$$

De (T13.53) o de (XIII.83) obtenemos para las funciones radiales de los estados $|2\,1\rangle$ y $|3\,0\rangle$ del átomo de hidrógeno

$$R_{2\,1}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0},$$

$$R_{3\,0}(30) = 2\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right)e^{-r/3a_0},$$

con lo cual

$$\begin{aligned}\langle 2\,1 \mid r \mid 3\,0\rangle &= \int_0^\infty r^3 R_{21}(r)\, R_{30}(r)\, dr \\ &= \frac{1}{9\sqrt{2}a_0^4}\left(\int_0^\infty r^4 e^{-5r/6a_0}\, dr - \frac{2}{3a_0}\int_0^\infty r^5 e^{-5r/6a_0}\, dr \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{27a_0^2}\int_0^\infty r^6 e^{-5r/6a_0}\, dr\right).\end{aligned}$$

Tomando en cuenta que

$$\int_0^\infty x^n e^{-x}\, dx = n!, \tag{XIII.216}$$

queda

$$\langle 2\,1 \mid r \mid 3\,0\rangle = \frac{4}{9\sqrt{2}}\left(\frac{6}{5}\right)^6 a_0. \tag{XIII.217}$$

Por otra parte, como

$$\omega_{32} = \frac{E_3 - E_2}{\hbar} = \frac{me^4}{2\hbar^3 c}c\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{9}\right) = \frac{5}{36}Rc,$$
$$R = \frac{\alpha}{2a_0}, \qquad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}, \tag{XIII.218}$$

se llega al resultado

$$A_{3s\to 2p} = 3\left(\frac{2}{5}\right)^9 \alpha^3 Rc. \tag{XIII.219}$$

Sustituyendo los valores

$$Rc \simeq 2\times 10^6\ \mathrm{s}^{-1}, \qquad \alpha \simeq \frac{1}{137},$$

se obtiene

$$A_{3s\to 2p} = 6.12\times 10^6\ \mathrm{s}^{-1}.$$

Por lo tanto, la vida media del estado $3s$ del átomo de hidrógeno resulta

$$T_{3s} = \frac{1}{A_{3s\to 2p}} \simeq 1.63\times 10^{-7}\,\mathrm{s}.$$

XIII.23 Estime el orden de magnitud de la vida media de los estados del hidrógeno que decaen con emisión en el visible. *Sugerencia*: confirme primero que las frecuencias en la región visible del espectro cumplen la relación (*puramente numérica*) $\omega_{\text{visible}} \sim (mc^2/8\hbar)\alpha^2$, donde α es la constante de estructura fina, $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$.

La serie de Balmer del hidrógeno cae en el visible y es producida por transiciones a los niveles con $n = 2$. La máxima energía que puede ser emitida dentro de esta serie está dada por el valor absoluto de la energía de estos estados, $|E_{2l}| = me^4/8\hbar^2$. La frecuencia que corresponde a esta energía es, expresada en términos de la constante de estructura fina,

$$\omega = \frac{me^4}{8\hbar^3} = \frac{m}{8\hbar^3}\hbar^2c^2\alpha^2 = \frac{mc^2}{8\hbar}\alpha^2 = \frac{\pi c}{4\lambda_C}\alpha^2, \tag{XIII.220}$$

que es la relación que se propone usar. La cantidad $\lambda_C = h/mc$ es la longitud de onda de Compton (que para el electrón vale 2.42×10^{-10} cm). Con $\alpha^2 \sim 5\times10^{-5}$ las frecuencias propuestas corresponden a longitudes de onda del orden

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega} \sim \frac{8\lambda_C}{\alpha^2} \sim 10^{-5}\ \text{cm},$$

que caen en la región visible del espectro.

De las expresiones obtenidas en el problema anterior sigue que, en orden de magnitud, el coeficiente de emisión espontánea para una transición permitida del hidrógeno en el visible se puede estimar como

$$A_{\text{in}\to\text{fin}} = \frac{4e^2\omega^3_{\text{visible}}}{3\hbar c^3} r_0^2, \tag{XIII.221}$$

donde r_0 debe ser un radio característico de la transición, que podemos tomar como $r_0 \sim a_0 = \hbar^2/me^2$, lo que da

$$A_{\text{in}\to\text{fin}} \sim \frac{e^2}{\hbar c^3}\frac{\hbar^4}{m^2e^4}\frac{m^3c^6}{8^3\hbar^3}\alpha^6 = \frac{mc^2}{\hbar}\frac{\alpha^5}{8^3} = \frac{\alpha^5}{8^3}\frac{c}{\lambda_C}. \tag{XIII.222}$$

A esta probabilidad por unidad de tiempo corresponde una vida media del orden

$$T \sim \frac{2^9}{\alpha^5}\frac{\lambda_C}{c} \simeq 2\times10^{-7}\ \text{s}.$$

XIII.24 Demuestre que el modelo usado para el deuterón en la sección 13.6 del texto predice correctamente que no existen estados ligados excitados de este sistema.

El modelo se construyó para describir un sistema débilmente ligado, y los parámetros del pozo (arbitrariamente tomado como cuadrado) fueron seleccionados para este fin. De esta manera, es natural esperar que las excitaciones correspondan a estados en el continuo (energía positiva). Esto se verifica fácilmente si llevamos la relación $|E_{\text{amarre}}| \ll V_0$ (E_{amarre} es la energía de amarre del deuterón, V_0 la profundidad del pozo) a su límite, y consideramos el caso $V_0 \to \infty$; en tales condiciones el espectro de energías queda dado por la ecuación (T13.96),

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}s_{nl}^2, \tag{XIII.223}$$

donde los números s_{nl} son las raíces sucesivas de la ecuación (T13.95), $j_l(ka) = 0$. De la tabla 13.1 del texto vemos que al primer estado excitado corresponde una raíz s_{1p} que es 1.4 veces mayor que la raíz s_{1s} del estado base, lo que da $E_{1p}/E_{1s} \simeq 2$, es decir, E_{1p} del orden de 4.5 MeV. Puesto que E_{1s} se encuentra apenas a poco más de 2 MeV del borde del pozo, el estado excitado cae en el continuo. Modelos más realistas no alteran esta conclusión.

XIII.25 Calcule el desfasamiento δ_0 (respecto de la onda de partícula libre) de la onda s producido por un potencial esférico uniforme de magnitud V_0, tanto para el caso atractivo como para el repulsivo. Discuta los límites de k_1/k (o k_2/k, según corresponda) grande o pequeña.

Este problema se resuelve con detalle en la sección 20.6 del texto, donde se muestra que, en el caso repulsivo, δ_0 varía monótonamente desde 0 hasta ka (ecuación (T20.100)), mientras que en el caso atractivo, δ_0 varía periódicamente con V_0 y se producen resonancias (ecuación (T20.103)).

XIII.26 Muestre que $\psi = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ es un eigenestado de $\hat{L}_z$ si y sólo si el vector $\mathbf{k}$ está orientado sobre el eje Oz.

Como

$$\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} = k_x x + k_y y + k_z z \tag{XIII.224}$$

se tiene que

$$\hat{L}_z\psi = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \hbar\left(k_y x - k_x y\right)\psi. \tag{XIII.225}$$

Este resultado se convierte en una ecuación de eigenvalores (es decir, un coeficiente constante de ψ en el lado derecho) sólo si $k_x = 0$, $k_y = 0$, que corresponde al eigenvalor cero, $\hat{L}_z\psi = 0$. Como k_z sigue siendo arbitraria, el vector $\mathbf{k}$ queda orientado sobre el eje Oz.

La función de onda $\psi = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ describe una distribución uniforme de partículas que se propagan libremente en la dirección del vector $\mathbf{k}$. Como este vector forma un ángulo arbitrario respecto al eje Oz, se generan todos los posibles valores del momento L_z, que es lo que dice en sustancia la ecuación (XIII.225). Sin embargo, cuando el movimiento de las partículas es paralelo al eje Oz, dada la uniformidad de la distribución no se genera ninguna componente angular respecto a dicho eje.

XIII.27 Demuestre la siguiente representación de la delta de Dirac:

$$\int_0^\infty j_l\left(kr\right)j_l\left(kr'\right)k^2\,dk = \frac{\pi}{2}\frac{\delta\left(r-r'\right)}{r^2}.$$

Esta fórmula se puede obtener directamente de la teoría de las funciones de Bessel, usando la propiedad [8]

$$\int_0^\infty J_\nu\left(\alpha\rho\right)J_\nu\left(\alpha'\rho\right)\rho\,d\rho = \frac{1}{\alpha}\delta\left(\alpha-\alpha'\right) \tag{XIII.226}$$

y la relación entre las funciones cilíndricas y esféricas de Bessel (TA.73),

$$j_n\left(x\right) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}J_{n+\frac{1}{2}}\left(x\right). \tag{XIII.227}$$

Combinando estas expresiones se obtiene

$$\begin{aligned}\int_0^\infty j_l\left(kr\right)j_l\left(kr'\right)k^2dk &= \frac{\pi}{2\sqrt{rr'}}\int_0^\infty kJ_{l+\frac{1}{2}}\left(kr\right)J_{l+\frac{1}{2}}\left(kr'\right)dk \\ &= \frac{\pi}{2\sqrt{rr'}}\frac{1}{r}\delta\left(r-r'\right) = \frac{\pi}{2}\frac{\delta\left(r-r'\right)}{r^2}.\end{aligned} \tag{XIII.228}$$

XIII.28 Demuestre que cuando un sistema cuántico posee dos o más operadores que conmutan con el hamiltoniano pero no entre sí, en general, los estados del sistema son degenerados. ¿Qué propiedad general del sistema refleja este hecho?

Sean $\hat{F}$ y $\hat{G}$ los dos operadores que no conmutan y

$$\hat{F}\varphi_n = f_n\varphi_n, \quad \hat{G}\psi_n = g_n\psi_n \tag{XIII.229}$$

[8] Véase, por ejemplo, Arfken (1985), p. 594. Una discusión más detallada de este problema puede verse en P. Unginčius, *Am. J. Phys.* **40** (1972) 1690.

sus ecuaciones de valores propios. Como $\hat{F}$ y $\hat{G}$ no conmutan se tendrá que, en general, $\varphi_n \neq \psi_n$. Sin embargo, como ambos operadores conmutan con el hamiltoniano, éste debe tener como funciones propias tanto a φ_n como a ψ_n, por lo que

$$\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n, \quad \hat{H}\psi_n = E_n\psi_n. \tag{XIII.230}$$

La forma de cumplir con la pareja de ecuaciones (XIII.230) de manera simultánea es escribiendo, por ejemplo,

$$\psi_n = \sum_i c_{n_i}\varphi_{n_i}, \quad \text{con } \hat{H}\varphi_{n_i} = E_n\varphi_{n_i}, \tag{XIII.231}$$

donde cada una de las funciones φ_{n_i} corresponde al mismo eigenvalor E_n de $\hat{H}$, pero puede corresponder a diferentes valores propios de $\hat{F}$. Que el desarrollo (XIII.231) se pueda hacer sigue de este hecho, pues las funciones propias del hamiltoniano conforman una base del correspondiente espacio de Hilbert, que está contenido en el de los operadores $\hat{F}$ y $\hat{G}$, puesto que éstos conmutan con el hamiltoniano. Como en general las funciones φ_n y ψ_n son diferentes, debe esperarse que más de un coeficiente c_{n_i} sea diferente de cero. Este desarrollo significa que las eigenfunciones φ_{n_i} de $\hat{H}$ requieren de un índice adicional i para su caracterización, y que la energía no depende de este índice. En otras palabras, en general, los estados propios de $\hat{H}$ son degenerados en este caso.

Un ejemplo simple y a la vez ilustrativo de una situación como la analizada lo ofrece el momento angular de un problema central. Por tratarse de una variable que se conserva (pues $\dot{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} = 0$), cada una de sus componentes cartesianas conmuta con el hamiltoniano, aunque ellas mismas no conmutan entre sí. Si sólo hubiera una componente del momento angular, que pudiéramos denotar como $\hat{l}$, los estados propios del sistema se caracterizarían por los números cuánticos n de energía y l de momento angular, para dar la base $|nl\rangle$. Pero la existencia del operador $\hat{L}_x$, por ejemplo, que también conmuta con el hamiltoniano y corresponde al mismo momento angular l, por no conmutar con las otras proyecciones de momento angular tiene sus funciones propias específicas, de la forma $\sum_m c_{lm}Y_l^m(\Omega)$ (véase como ejemplo el ejercicio XII.46), lo que demanda la existencia del número cuántico m y da lugar a los estados $|nlm\rangle$. El sistema es degenerado respecto de este número cuántico, precisamente por la simetría central del problema, que hace al hamiltoniano independiente de cualquier dirección privilegiada y, por lo tanto, independiente de la dirección en que arbitrariamente se oriente al eje Oz.

Como ejemplo específico considérese al rotor rígido, cuya función de onda general la escribimos en la forma (como sigue de la discusión en la sección 13.2 del texto)

$$\psi(t) = \sum_{l,m} c_{lm}Y_l^m e^{-iE_l t/\hbar}. \tag{XIII.232}$$

El valor esperado del hamiltoniano, de $\hat{L}_z$ y de $\hat{L}_\pm$ en este estado es (usamos las ecuaciones (XII.75)–(XII.76))

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \sum_{l,m} E_l \left|c_{lm}\right|^2, \tag{XIII.233}$$

$$\left\langle \hat{L}_z \right\rangle = \hbar \sum_{l,m} m \left|c_{lm}\right|^2, \tag{XIII.234}$$

$$\left\langle \hat{L}_\pm \right\rangle = -\hbar \sum_{l,m} \sqrt{(l \pm m - 1)(l \mp m)}\, c^*_{lm\pm1}c_{lm}. \tag{XIII.235}$$

En general, cabría esperar que el valor esperado de los operadores para los cuales Y_l^m no es una función propia dependiera del tiempo. Sin embargo, vemos que éste no es el caso para $\hat{L}_\pm$, pues este operador conmuta con el hamiltoniano, y su valor medio resulta dado por combinaciones de amplitudes $c^*_{lm\pm1}$, c_{lm} que se refieren a diferentes estados (diferentes m's), pero con la misma l, es decir, con la misma energía E_l. Luego al valor propio E_l tienen que corresponder en general varias funciones de onda. Es claro, sin embargo, que el valor esperado de un operador que conmuta con $\hat{L}_z$ pero no con el hamiltoniano, depende explícitamente del tiempo. Por ejemplo, se tiene que (véase ejercicio XIII.41)

$$\begin{aligned}\langle z\rangle &= \sum_{l,m}\left[\sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}c^*_{l+1,m}c_{lm}e^{i\omega_{l+1,l}t}\right.\\ &\left.+\sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l+1)(2l-1)}}c^*_{l-1,m}c_{lm}e^{-i\omega_{l,l-1}t}\right].\end{aligned}\tag{XIII.236}$$

Otra versión de esta misma cuestión se estudia en el problema IX.20.

XIII.29 Use las ecuaciones de Schrödinger para el átomo de hidrógeno y para una molécula diatómica modelada con un potencial de Morse, expresadas en términos del operador $\hat{Q}_{1-}$ definido por la ecuación (T13.138), para relacionar el espectro del átomo de hidrógeno con los parámetros y el espectro del potencial de Morse.

Trataremos primero el átomo hidrogenoide. Multiplicando la ecuación radial de Schrödinger

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\hbar^2 l\,(l+1)}{2m_0r^2}-\frac{Ze^2}{r}\right)u=Eu$$

por r y haciendo el cambio de variable $q=\alpha r$, con $\alpha=\sqrt{-2m_0E/\hbar^2}$ se obtiene

$$\left(-q\frac{d^2}{dq^2}+\frac{l\,(l+1)}{q}+q\right)u=\frac{Ze^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m_0}{-E}}u.\tag{XIII.237}$$

Comparando esta ecuación con la forma que la expresión (T13.138),

$$\hat{Q}_{n\pm}=q^n\pm\left(\frac{\lambda}{q^n}+\frac{1}{q^{n-2}}\frac{d^2}{dq^2}\right),\tag{XIII.238}$$

toma para $n=1$, $\lambda=-l\,(l+1)$ y el signo inferior,

$$\hat{Q}_{1-}=q-\left(-\frac{l\,(l+1)}{q}+q\frac{d^2}{dq^2}\right),\tag{XIII.239}$$

se concluye que puede reescribirse como

$$\hat{Q}_{1-}u=\frac{Ze^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m_0}{-E}}u.\tag{XIII.240}$$

Insertando los valores $n=1$ y $\lambda=-l\,(l+1)$ en la expresión (T13.143),

$$Q_0=n\pm\sqrt{1-4\lambda}\geq 0,\tag{XIII.241}$$

se obtiene

$$Q_0 = 1 \pm \sqrt{1 + 4l\,(l+1)} = 1 \pm (2l+1) \geq 0, \tag{XIII.242}$$

de donde sigue que debe tomarse sólo el signo positivo, lo que da

$$Q_0 = 2\,(l+1)\,. \tag{XIII.243}$$

Utilizando ahora la ecuación (T13.142)

$$Q_i = Q_0 + 2ni, \tag{XIII.244}$$

se obtiene

$$Q_k = Q_0 + 2k = 2\,(k+l+1)\,, \tag{XIII.245}$$

donde k debe ser un número entero, lo que, combinado con (XIII.240) conduce a

$$2\,(k+l+1) = \frac{Ze^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m_0}{-E}}u. \tag{XIII.246}$$

Despejando, los eigenvalores de la energía para el átomo de hidrógeno ($Z = 1$) resultan

$$E_{kl} = -\frac{e^4 m_0}{2\hbar^2\,(k+l+1)^2}, \tag{XIII.247}$$

expresión que coincide con (T13.51) cuando se introduce el número cuántico principal $n = k + l + 1$.

Trataremos ahora con la misma técnica el caso del *potencial de Morse*, utilizado con frecuencia en el estudio de moléculas diatómicas para aproximar el potencial interatómico. El potencial de Morse tiene la forma dada en la ecuación (T13.148)

$$V\,(r) = D\left(e^{-2r/a} - 2e^{-r/a}\right), \tag{XIII.248}$$

con a un parámetro adecuado del orden de la distancia interatómica. La ecuación de Schrödinger radial para este potencial y estados s es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dr^2} + D\left(e^{-2r/a} - 2e^{-r/a}\right)\right]\varphi = E\varphi. \tag{XIII.249}$$

Haciendo el cambio de variable $x = r/a$, definiendo la constante $K = a\sqrt{2m_0 D}/\hbar$ y la energía adimensional $\mathcal{E} = \left(2m_0 a^2/\hbar^2\right)E$, esta expresión se reduce a

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + K^2\left(e^{-2x} - 2e^{-x}\right)\right]\varphi = \mathcal{E}\varphi. \tag{XIII.250}$$

Para deshacerse de los exponenciales es conveniente hacer un nuevo cambio de variables poniendo $q = Ke^{-x}$, $\varphi = \chi/\sqrt{q}$, pues con ello se llega a la ecuación

$$\left(-q\frac{d^2}{dq^2} - \frac{1}{4q} + q - 2K\right)\chi = \frac{\mathcal{E}}{q}\chi, \tag{XIII.251}$$

que es posible reescribir como la ecuación de valores propios

$$\left(-q\frac{d^2}{dq^2} - \frac{\mathcal{E}+\frac{1}{4}}{q} + q\right)\chi = 2K\chi. \tag{XIII.252}$$

Procediendo como antes pero con $\lambda = \mathcal{E}+1/4$, esta expresión puede escribirse como

$$\hat{Q}_{1-}\varphi = 2K\varphi. \tag{XIII.253}$$

A su vez, de (XIII.241) con $n = 1$ se tiene (tampoco aquí es aplicable la raíz que corresponde al signo $-$)

$$Q_0 = 1 + \sqrt{1 - 4\left(\mathcal{E}+\frac{1}{4}\right)} = 1 + 2\sqrt{-\mathcal{E}}, \tag{XIII.254}$$

de donde sigue, usando otra vez (XIII.244), que

$$Q_k = Q_0 + 2k = 1 + 2\sqrt{-\mathcal{E}} + 2k = 2K, \tag{XIII.255}$$

con k un número entero. Finalmente, el espectro para el potencial de Morse resulta

$$\mathcal{E}_k = \frac{2m_0a^2}{\hbar^2}E_k = -\left(K - \frac{1}{2} - k\right)^2. \tag{XIII.256}$$

Ahora estamos en condiciones de comparar los dos problemas y establecer las correspondencias solicitadas entre ellos. Expresadas en términos de la variable q, la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno (ecuación (XIII.240)) y la correspondiente para el potencial de Morse (ecuación (XIII.253)) tienen la misma forma, excepto por los parámetros que contienen. La comparación (para $Z = 1$) permite hacer las identificaciones

$$\mathcal{E}+\frac{1}{4} \leftrightarrow -l\,(l+1)\,, \tag{XIII.257}$$

$$2K \leftrightarrow \frac{e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m_0}{-E_H}}, \tag{XIII.258}$$

donde hemos denotado por E_H los valores propios de la energía del átomo de hidrógeno y por $\mathcal{E}$ los del potencial de Morse. Expresamos $\mathcal{E}$ en términos de E_H insertando un signo de igualdad en las expresiones anteriores, lo que da

$$E_H = -\frac{e^4m_0}{2\hbar^2K^2}. \tag{XIII.259}$$

Usando (XIII.247), esta expresión se reduce a

$$K = k + l + 1 \quad \Rightarrow l = K - k - 1, \tag{XIII.260}$$

resultado que insertado en (XIII.257) (tomando la igualdad), da

$$\mathcal{E} + \frac{1}{4} = -\,(K - k - 1)\,(K - k)\,, \tag{XIII.261}$$

es decir

$$\mathcal{E} = \frac{2m_0a^2}{\hbar^2}E_k = -\left(K - k - \frac{1}{2}\right)^2 = -(l + \frac{1}{2})^2, \tag{XIII.262}$$

que es el espectro previamente determinado. Usando (XIII.259) podemos escribir alternativamente

$$E_H = -\frac{Z^2e^4m_0}{2\hbar^2}\frac{1}{\left(\sqrt{-\mathcal{E}} + k + \frac{1}{2}\right)^2}. \tag{XIII.263}$$

La relación entre las variables q de ambos problemas es logarítmica y se puede escribir en la forma $\ln q_{\mathrm{Morse}} = A + Bq_{\mathrm{H}}$.

XIII.2. Problemas adicionales

XIII.30 Una función propia del átomo hidrogenoide es

$$\psi = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(6-\frac{Zr}{a_0}\right)\frac{Zr}{a_0}e^{-Zr/3a_0}\cos\theta.$$

a) Determine los valores de los números cuánticos n, l y m_l.

b) Genere a partir de esta función propia otra función propia con los mismos valores de n y l, pero con número cuántico magnético incrementado en la unidad.

c) Determine el valor más probable de r cuando el átomo se encuentra en el estado especificado por esta ψ.

La función de onda del átomo hidrogenoide es de la forma $\psi_{nlm} = R_{nl}Y_l^m$, en donde Y_l^m es un armónico esférico dado por

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}(-1)^m P_l^m(\cos\theta)\,e^{im\varphi}; \tag{XIII.264}$$

$R_{nl}(r)$ es la solución de la ecuación radial de Schrödinger (T13.53) y tiene la forma

$$R_{nl} = C_{nl}\left(\frac{2Zr}{a_0 n}\right)^l e^{-Zr/a_0 n}Q_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{a_0 n}\right). \tag{XIII.265}$$

Los números cuánticos n, l y m asociados a ψ pueden obtenerse por simple inspección. Como ψ no depende del ángulo φ, necesariamente $m = 0$. Por otra parte, como $\cos\theta = P_1^0(\cos\theta)$, se tiene que $l = 1$. Finalmente, comparando el argumento de la exponencial que aparece en ψ con la expresión para R_{nl} es evidente que $n = 3$. Una comparación detallada con los polinomios de Laguerre que corresponden a los índices $n-l-1 = 1$, $2l+1 = 3$ permite verificar los resultados anteriores, pues se obtiene que

$$\psi_{310} = R_{31}(r)Y_1^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(6-\frac{Zr}{a_0}\right)\left(\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/3a_0}\cos\theta, \tag{XIII.266}$$

que es precisamente la función de onda propuesta.

Para una situación menos inmediata se haría necesario obtener los resultados de manera más formal; esto se puede hacer de manera sencilla utilizando las ecuaciones de eigenvalores, como sigue: El número cuántico $n = 3$ se obtiene inmediatamente insertando la ψ dada en la ecuación de Schrödinger (T12.65), para obtener

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}-\frac{Ze^2}{r}\right]\psi \\ &= -\frac{Z^2e^2}{18a_0}\psi = E_n\psi = -\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2}\psi,\end{aligned} \tag{XIII.267}$$

de donde es inmediato el valor de n. Para investigar el valor de l (o mejor, de $l(l+1)$) escribimos la ecuación de eigenvalores (abreviando $\psi = g(r)\cos\theta$)

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2\psi &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)g(r)\cos\theta \\ &= 2\hbar^2 g(r)\cos\theta = 2\hbar^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi,\end{aligned} \tag{XIII.268}$$

que da de inmediato $l = 1$. Finalmente, la ecuación de valores propios para la proyección del momento angular

$$\hat{L}_z\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}g\left(r\right)\cos\theta = 0 = m\psi \tag{XIII.269}$$

muestra que $m = 0$.

Para obtener a partir de $\psi = \psi_{310}$ una eigenfunción con los mismos números cuánticos n y l pero con número cuántico magnético $m + 1 = 1$, basta aplicarle a ψ_{310} el operador de ascenso $\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$ y utilizar la fórmula (T12.98),

$$\hat{L}_+\psi_{nlm} = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\left(l+m+1\right)\left(l-m\right)}\psi_{nlm+1}. \tag{XIII.270}$$

En coordenadas esféricas el operador de ascenso es

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ &= i\hbar\left[\left(\operatorname{sen}\varphi - i\cos\varphi\right)\frac{\partial}{\partial\theta} - \left(\cos\varphi + i\operatorname{sen}\varphi\right)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] \\ &= \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).\end{aligned} \tag{XIII.271}$$

En el presente caso se obtiene

$$\hat{L}_+\psi_{310} = g\left(r\right)\hat{L}_+\cos\theta = -\hbar g\left(r\right)e^{i\varphi}\operatorname{sen}\theta = \sqrt{2}\hbar\psi_{311}. \tag{XIII.272}$$

El estado solicitado es entonces

$$\psi_{311} = -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\varphi}g\left(r\right)\operatorname{sen}\theta. \tag{XIII.273}$$

El valor más probable de r cuando el átomo se encuentra en el estado ψ ocurre donde $\left|r\psi\right|^2$ alcanza su valor máximo. Escribiendo el producto $r\psi$ en la forma

$$r\psi = f\left(\theta\right)\left(6r^2 - \frac{r^3}{a_0}\right)e^{-r/3a_0}, \tag{XIII.274}$$

el valor que maximiza $r\psi$ satisface la condición

$$\left(12r - \frac{5r^2}{a_0} + \frac{r^3}{3a_0^2}\right)e^{-r/3a_0} = 0, \tag{XIII.275}$$

que tiene las soluciones

$$r = 0, \quad r = 3a_0, \quad r = 12a_0. \tag{XIII.276}$$

Es fácil verificar que $r = 12a_0$ es la solución que corresponde al valor más probable de r.

XIII.31 Determine el valor medio de la energía cinética de un átomo hidrogenoide que se encuentra en un estado estacionario y muestre que se verifica el teorema del virial. ¿Qué fracción de la energía cinética media corresponde al movimiento radial?

Para el potencial coulombiano se puede escribir

$$\langle K\rangle \equiv \left\langle \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\right\rangle = \langle E - V(r)\rangle = E_n + Ze^2\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle . \tag{XIII.277}$$

Utilizando la expresión para $\left\langle r^{-1}\right\rangle$ obtenida en el problema XIII.13 y los eigenvalores de la energía del átomo hidrogenoide, se obtiene

$$\langle K\rangle \equiv \frac{Z^2e^2}{2a_0n^2} = -E_n. \tag{XIII.278}$$

La relación $\langle K\rangle = -E_n$ es precisamente la predicha por el teorema del virial para el átomo hidrogenoide. De manera similar se tiene

$$\langle V\rangle = -Ze^2\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle = -\frac{Z^2e^2}{a_0n^2} = -2\langle K\rangle . \tag{XIII.279}$$

Usamos ahora la ecuación (T12.62) para escribir la energía cinética media en la forma

$$\langle K\rangle = \left\langle \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2}\right\rangle = \langle K\rangle_{\text{radial}} + \frac{\hbar^2 l\,(l+1)}{2m}\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle , \tag{XIII.280}$$

donde

$$\hat{p}_r^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} \tag{XIII.281}$$

es el operador de momento en la dirección radial. Utilizando $\left\langle r^{-2}\right\rangle$ del problema XIII.13, queda

$$\begin{aligned}\langle K\rangle &= \langle K\rangle_{\text{radial}} + \frac{Z^2e^2}{a_0n^2}\frac{l\,(l+1)}{n\,(2l+1)}\\ &= \langle K\rangle_{\text{radial}} + \frac{2l\,(l+1)}{n\,(2l+1)}\langle K\rangle ,\end{aligned} \tag{XIII.282}$$

es decir,

$$\langle K\rangle_{\text{radial}} = \langle K\rangle\left[1 - \frac{2l\,(l+1)}{n\,(2l+1)}\right] . \tag{XIII.283}$$

Este resultado muestra que para los estados s ($l = 0$) toda la energía cinética es radial, mientras que para las órbitas de mínima excentricidad (con $l = n-1$), la energía cinética está básicamente asociada a la rotación, particularmente para estados muy excitados, pues en tal caso $\langle K\rangle_{\text{radial}} = \langle K\rangle / (2n-1) \ll \langle K\rangle$.

XIII.32 Bajo ciertas circunstancias es posible aproximar la interacción de un protón y un neutrón con el potencial $V(r) = -V_0e^{-r/a}, V_0 > 0$. Encuentre la función de onda que este modelo predice para el estado base del deuterón y determine la relación entre la profundidad del pozo V_0 y el parámetro a que caracteriza el alcance de la fuerza. *Observación:* la energía de ligadura del deuterón es de $E = -2.23$MeV y existe sólo un estado ligado de este sistema.[9]

[9]La bajísima energía de amarre del deuterón jugó un papel importante durante las etapas iniciales de formación del universo. Las muy altas temperaturas reinantes hicieron que los núcleos de deuterón que llegaban a formarse se fisionaran rapidamente, por lo que no pudieron sintetizarse los núcleos de He a partir de los protones y neutrones libres (síntesis que pasa por el deuterón) hasta que la temperatura del universo se redujo lo suficiente, cerca de un millón de años desde el *big bang*.

La ecuación radial de Schrödinger para este sistema está dada por la expresión (T13.24), con $u = rR(r)$, y es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l\,(l+1)}{2m_0 r^2} - V_0 e^{-r/a}\right] u = Eu, \tag{XIII.284}$$

donde m_0 es la masa reducida del sistema,

$$m_0 = \frac{M_p M_n}{M_p + M_n} \simeq \frac{M}{2}, \tag{XIII.285}$$

pues $M_p \simeq M_n \simeq M$. Como el estado base es un estado s, la ecuación (XIII.284) se reduce a

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(V_0 e^{-r/a} + E\right)\right] u = 0. \tag{XIII.286}$$

Con el cambio de variable

$$\xi = e^{-r/2a} \tag{XIII.287}$$

queda

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{du}{d\xi} + \frac{8m_0a^2}{\hbar^2}\left(\frac{E}{\xi^2} + V_0\right) u = 0. \tag{XIII.288}$$

Para darle forma adimensional a esta ecuación es conveniente introducir los parámetros

$$k^2 = -\frac{8m_0a^2E}{\hbar^2}, \quad q^2 = \frac{8m_0a^2V_0}{\hbar^2}, \tag{XIII.289}$$

lo que la reduce a una ecuación de Bessel

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{du}{d\xi} + \left(q^2 - \frac{k^2}{\xi^2}\right) u = 0 \tag{XIII.290}$$

con solución general

$$u = B_1 J_k\,(q\xi) + B_2 N_{.k}\,(q\xi)\,. \tag{XIII.291}$$

$J_k\,(z)$ y $N_k(z)$ son funciones cilíndricas de Bessel y de Neumann, respectivamente.[10] Para $r \to \infty$ (es decir, $\xi \to 0$) la función de onda debe anularse, pero como las funciones $N_k\,(\xi)$ no satisfacen esta condición, debe tomarse $B_2 = 0$, con lo que queda

$$u = BJ_k\,(q\xi)\,. \tag{XIII.292}$$

De esta manera, la función de onda radial para el estado base resulta

$$R = \frac{B}{r} J_k\left(qe^{-r/2a}\right). \tag{XIII.293}$$

Por otro lado, la amplitud $R(r)$ debe ser finita en $r = 0$, lo que exige que se satisfaga la condición

$$J_k\,(q) = 0. \tag{XIII.294}$$

Esta condición fija una relación necesaria entre los valores permitidos para los parámetros a y V_0 del modelo. La solución que debe tomarse para (XIII.294) debe corresponder a la primera raíz de la función de Bessel, pues este valor es el que

[10] Estas funciones se discuten brevemente en la sección A.5 del texto y en el capítulo de apéndices al final de este volumen.

corresponde al mínimo de V_0 y, por lo tanto, a un potencial que pueda permitir un estado ligado único.

Usando los valores numéricos de m_0 y E se obtiene

$$k = 0.458a, \tag{XIII.295}$$

$$V_0 = 10.63\frac{q^2}{a^2} = 2.23\frac{q^2}{k^2}, \tag{XIII.296}$$

donde a está en fm y V_0 en MeV. Para un valor dado de a, (XIII.295) determina k; sustituyendo en (XIII.294) se obtiene q y, finalmente, de (XIII.296) sigue V_0. De (XIII.296) se obtiene que la relación buscada es

$$V_0 a^2 = 10.63q^2 \text{ MeV-fm}^2. \tag{XIII.297}$$

En la tabla adjunta se listan algunos posibles juegos de valores de los parámetros.

k	a	q	V_0
0.2	0.436	2.707	409
0.4	0.873	2.999	125
1.0	2.180	3.832	32.7
1.2	2.62	4.099	26.1
1.4	3.05	4.363	21.7

XIII.33 Estudie los estados estacionarios de un oscilador isotrópico bidimensional empleando tanto coordenadas polares como el método de los operadores de creación y aniquilación.

Es pertinente hacer algunas observaciones iniciales. En la subsección 13.9.5 del texto se estudia el oscilador armónico N-dimensional y se concluye que el espectro de la energía es

$$E_n = \left(2k + l + \frac{1}{2}N\right)\hbar\omega, \quad k = 0, 1, 2, \ldots \tag{XIII.298}$$

El término $\frac{1}{2}N\hbar\omega$ corresponde a la energía del punto cero de N osciladores unidimensionales, por lo que $n = 2k + l$ determina el nivel de excitación, con $n = 0, 1, 2, \ldots$ Es interesante notar que en la correspondiente ecuación de Schrödinger el término que debe agregarse al potencial de la ecuación radial del problema reducido unidimensional para obtener el potencial efectivo (el potencial centrífugo), es de la forma $V_{\text{centr}} = \left(\hbar^2/2mr^2\right)\lambda_N$, con

$$\lambda_N = \frac{1}{4}(N-1)(N-3) + l(l+N-2). \tag{XIII.299}$$

Para $N = 1, 2, 3$ dimensiones, este parámetro toma los valores

$$\lambda_1 = (l-1)l, \quad \lambda_2 = (l - \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2}), \quad \lambda_3 = l(l+1); \tag{XIII.300}$$

λ_2 y λ_3 pueden obtenerse del valor anterior agregando la cantidad $\frac{1}{2}$ al valor de l. Con esta regla, de la fórmula (XIII.108) para la energía del oscilador tridimensional sigue precisamente (XIII.298) para $N = 2$. La validez de esta observación es reforzada por los resultados del problema ilustrativo 13.4 del texto, donde se demuestra que el término centrífugo es $\left(\hbar^2/2mr^2\right)l(l+1)$ para

los problemas centrales tridimensionales, y $\left(\hbar^2/2mr^2\right)(k-1/2)(k+1/2)$ para los problemas isotrópicos en el plano, lo que reconduce a la regla $l \longleftrightarrow k-1/2$ que transforma el entero l en el semientero $k-1/2$, o viceversa, al hacer la transición de 3 a 2 dimensiones, o viceversa.

Es importante observar, sin embargo, que la unicidad de la función de onda bidimensional demanda *sólo* que $|k|$ sea un entero, sin restringir k a ser positiva. Esto es resultado del hecho de que para un movimiento en el plano sólo es posible definir una componente de momento angular, que podemos tomar como

$$\hat{L}_z = i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{XIII.301}$$

debido a lo cual los valores propios de los operadores $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_z^2$ coinciden en este caso. En otras palabras, el número cuántico k corresponde a los valores propios de $\hat{L}_z$, que hemos denotado sistemáticamente como m para el caso tridimensional. Es fácil verificar que $\left[\hat{H}, \hat{L}_z\right] = 0$ para el presente problema, y como estos dos operadores constituyen un conjunto completo de operadores conmutativos, la base está constituida por los vectores comunes a ellos.

La ecuación a resolver en coordenadas polares en el plano es

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\psi + \frac{1}{2}m_0\omega^2 r^2\psi = E\psi. \tag{XIII.302}$$

Las variables se separan escribiendo $\psi(r,\varphi) = F(r)\Phi(\varphi)$, lo que conduce a la pareja de ecuaciones

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = A\Phi, \tag{XIII.303}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{A}{r^2}\right)F + \frac{1}{2}m_0\omega^2 r^2 F = EF. \tag{XIII.304}$$

De la primera de estas ecuaciones se obtiene

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \quad A = -m^2, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots \tag{XIII.305}$$

La cuantización del momento angular se deriva de la condición de unicidad de $\Phi(\varphi)$ dentro del intervalo $(0, 2\pi)$. Sustituyendo se obtiene para la función radial

$$\frac{\partial^2 F}{\partial\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial F}{\partial\xi} + \left(-\frac{m^2}{\xi^2} + \mathcal{E} - \xi^2\right)F = 0, \tag{XIII.306}$$

en donde la nueva variable adimensional ξ está dada por

$$r = \beta\xi, \quad \beta = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0\omega}}, \quad \mathcal{E} = \frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{XIII.307}$$

Un análisis del comportamiento asintótico de las soluciones de la ecuación diferencial (XIII.306) para $r \to 0$ y $r \to \infty$ conduce a escribir las soluciones de interés en la forma

$$F(r) = r^l e^{-\xi^2/2}u(\xi), \tag{XIII.308}$$

con $l = |m|$; el procedimiento arroja la ecuación diferencial

$$u'' + \left(\frac{2l+1}{\xi} - 2\xi\right) u' + (\mathcal{E} - 2(l+1))\, u = 0. \tag{XIII.309}$$

Con el cambio de variable $\xi^2 = x$ (XIII.309) se transforma en una ecuación hipergeométrica confluente similar a (XIII.90) o (XIII.104), que tiene como soluciones de interés

$$u(\xi) = CM(a, c; \xi^2), \quad a = \frac{1}{2}(l+1) - \frac{1}{4}\mathcal{E}, \quad c = l + 1. \tag{XIII.310}$$

Para garantizar el comportamiento asintótico adecuado y la integrabilidad cuadrática de las soluciones es necesario exigir que la constante a sea de la forma $a = -n$, con $n \geq 0$ un número entero. Esto da para los niveles estacionarios las energías

$$E = (2n + l + 1)\,\hbar\omega = (2n + |m| + 1)\,\hbar\omega, \tag{XIII.311}$$

tal como se había previsto.

Para escribir la función de onda es conveniente expresar $M(a, c; \xi^2)$ en términos de un polinomio generalizado de Laguerre en la forma[11]

$$L_n^\alpha(x) = \begin{pmatrix} n+\alpha \\ n \end{pmatrix} M(-n, \alpha + 1; x). \tag{XIII.312}$$

El resultado, correctamente normalizado, es

$$\psi_{nm}(\xi, \varphi) = \frac{1}{\beta}\left(\frac{n!}{\pi(n+l)!}\right)^{1/2} \xi^l e^{-\xi^2/2} L_n^l(\xi^2) e^{im\varphi}, \quad l = |m|\,. \tag{XIII.313}$$

Verificamos con esto que los vectores de la base dependen sólo de dos números cuánticos independientes.

Para analizar el problema con el método de los operadores de creación y aniquilación, escribimos, considerando que los osciladores se encuentran sobre los ejes Ox, Oy,

$$\hat{a}_x = \frac{1}{\sqrt{2}\beta}\left(\hat{x} + i\frac{\hat{p}_x}{m_0\omega}\right), \quad \hat{a}_y = \frac{1}{\sqrt{2}\beta}\left(\hat{y} + i\frac{\hat{p}_y}{m_0\omega}\right), \tag{XIII.314}$$

$$\left[\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger\right] = 1, \quad \left[\hat{a}_y, \hat{a}_y^\dagger\right] = 1, \quad \hat{N}_x = \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x, \quad \hat{N}_y = \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y, \tag{XIII.315}$$

etc., donde $\hat{N}_x, \hat{N}_y$ son los operadores de número; por simplicidad en la escritura —y siguiendo una práctica usual— se ha escrito 1 en vez de $\mathbb{I}$ donde esto no da lugar a confusión. Además, usamos la ecuación (T11.51) para escribir

$$\hat{L}_z = i\hbar(\hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y), \tag{XIII.316}$$

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + 1). \tag{XIII.317}$$

Es posible diagonalizar simultáneamente la pareja de operadores $\hat{H}$ y $\hat{L}_z$ introduciendo los operadores

$$\hat{a}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_x - i\hat{a}_y\right), \quad \hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_x + i\hat{a}_y\right) \tag{XIII.318}$$

y sus adjuntos. Es fácil constatar que los únicos conmutadores no nulos entre estos cuatro operadores son

$$\left[\hat{a}_+, \hat{a}_+^\dagger\right] = 1, \quad \left[\hat{a}_-, \hat{a}_-^\dagger\right] = 1. \tag{XIII.319}$$

[11] Gradshteyn y Ryzhik (1986), 8.972.1.

Se encuentra por sustitución directa que

$$\hat{L}_z = \hbar(\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+ - \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_-), \tag{XIII.320}$$

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+ + \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_- + 1). \tag{XIII.321}$$

Los nuevos operadores continúan actuando como operadores de creación o de aniquilación, según lleven o no daga. Para verificar esto, consideremos estados propios de $\hat{H}$ de la forma $|n_x, n_y\rangle$ (véase ecuación (XIII.317)), que son eigenestados de $\hat{H}$ con energía propia $(n_x + n_y + 1)\hbar\omega$. Se tiene, usando la ecuación (T11.43a), que, por ejemplo,

$$\begin{aligned} \hat{a}_+ |n_x, n_y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_x - i\hat{a}_y) |n_x, n_y\rangle \\ &= \sqrt{\frac{1}{2}n_x} |n_x - 1, n_y\rangle - i\sqrt{\frac{1}{2}n_y} |n_x, n_y - 1\rangle . \end{aligned} \tag{XIII.322}$$

El estado resultante ha perdido una excitación $\hbar\omega$, sea por reducción en la unidad de n_x o de n_y, por lo que es estado propio del hamiltoniano con energía $\hbar\omega(n_x + n_y)$. Esto revela al operador $\hat{a}_+$ como operador de aniquilación de los estados etiquetados como "+"; algo similar sucede con $\hat{a}_-$. El sentido de los estados + y − puede leerse de las ecuaciones (XIII.320) y (XIII.321): los estados + contribuyen positivamente a la energía y al momento angular sobre el eje z; a su vez, los estados − contribuyen positivamente a la energía, pero negativamente al momento angular. Por lo tanto, se trata de operadores de creación o aniquilación de estados de energía y momento angular en torno al eje Oz bien definidos, esta última positiva o negativa, respectivamente. Estos operadores juegan un papel análogo al de los operadores de polarización circular. Los estados propios simultáneos de los operadores $\hat{L}_z$ y $\hat{H}$ dados en (XIII.320) y (XIII.321) son, según sigue de la ecuación (T11.44),

$$|n_+, n_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_+! n_-!}} \left(\hat{a}_+^\dagger\right)^{n_+} \left(\hat{a}_-^\dagger\right)^{n_-} |0, 0\rangle . \tag{XIII.323}$$

Los correspondientes eigenvalores son

$$E_n = \hbar\omega(n + 1), \quad L_z = \hbar m, \quad n = n_+ + n_-, \quad m = n_+ - n_-. \tag{XIII.324}$$

En particular, el estado base corresponde a $n_+ = n_- = 0$, es decir, $n = 0$, $m = 0$.

Para construir las funciones de onda se puede proceder como sigue: En el sistema polar de coordenadas r, φ se tiene $x = r\cos\varphi$, $y = r\,\mathrm{sen}\,\varphi$, por lo que se puede escribir (entendiendo el signo de igualdad como referido a la correspondiente representación), por ejemplo,

$$\begin{aligned} \hat{a}_+ &= \frac{1}{2\beta}\left[x - iy + \beta^2\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right)\right] \\ &= \frac{e^{-i\varphi}}{2}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{i}{\xi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right); \end{aligned} \tag{XIII.325}$$

$$\hat{a}_+^\dagger = \frac{e^{i\varphi}}{2}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{i}{\xi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{XIII.326}$$

y así sucesivamente. La función de onda del estado base, normalizada, solución de la ecuación $\hat{a}_+\psi_{0,0} = 0$, es

$$\psi_{0,0}(\xi, \varphi) = \frac{1}{\beta\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2/2}, \tag{XIII.327}$$

y el estado general queda

$$\psi_{n_+,n_-}(\xi,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{n_+!n_-!}} \left(\hat{a}_+^\dagger\right)^{n_+} \left(\hat{a}_-^\dagger\right)^{n_-} \psi_{0,0}(\xi,\varphi). \tag{XIII.328}$$

Como, por otra parte, de (XIII.326) sigue que

$$\hat{a}_+^\dagger \left(e^{im\varphi}\xi^m e^{-\xi^2/2}\right) = e^{i(m+1)\varphi}\xi^{m+1}e^{-\xi^2/2}, \tag{XIII.329}$$

la aplicación sucesiva de $\hat{a}_+^\dagger$ al estado $\psi_{0,0}(\xi,\varphi)$ da, usando (XIII.328)

$$\psi_{n_+,0}(\xi,\varphi) = \frac{1}{\beta\sqrt{\pi n_+!}} e^{in_+\varphi}\xi^{n_+}e^{-\xi^2/2}. \tag{XIII.330}$$

En el siguiente problema y en el ejercicio XIII.44 se complementa este tema.

XIII.34 Construya los estados coherentes de un oscilador isotrópico bidimensional y estudie la evolución temporal de los valores medios de sus variables fundamentales.

En la sección 11.6 del texto se muestra que los estados coherentes de un oscilador unidimensional están dados por los estados propios del operador de aniquilación, ecuación (T11.66),

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle\,, \tag{XIII.331}$$

y que estos estados tienen la propiedad de que $\langle\alpha|\,x(t)\,|\alpha\rangle$ corresponde al valor clásico de $x(t)$, de tal manera que se les puede ver como el análogo cuántico de los osciladores clásicos. Para construir estados coherentes del oscilador bidimensional se puede proceder por extensión del caso unidimensional y definirlos como el producto directo (tensorial) de los estados coherentes unidimensionales, es decir,

$$|\alpha_x,\alpha_y\rangle = |\alpha_x\rangle \otimes |\alpha_y\rangle = \sum_{n_x=0}^{\infty}\sum_{n_y=0}^{\infty} c_{n_x}(\alpha_x)c_{n_y}(\alpha_y)\left|\varphi_{n_xn_y}\right\rangle, \tag{XIII.332}$$

donde $\left|\varphi_{n_xn_y}\right\rangle$ representa el producto de estados propios de los osciladores, y los coeficientes c_n están dados por la fórmula (T11.70)

$$c_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2/2}. \tag{XIII.333}$$

Con esta construcción se cumple que

$$\hat{a}_x\,|\alpha_x,\alpha_y\rangle = \alpha_x\,|\alpha_x,\alpha_y\rangle\,, \quad \hat{a}_y\,|\alpha_x,\alpha_y\rangle = \alpha_y\,|\alpha_x,\alpha_y\rangle\,, \tag{XIII.334}$$

expresiones que, debidamente combinadas y con ayuda de (XIII.318), pueden reescribirse en la forma

$$\hat{a}_+\,|\alpha_x,\alpha_y\rangle = \alpha_+\,|\alpha_x,\alpha_y\rangle\,, \quad \hat{a}_-\,|\alpha_x,\alpha_y\rangle = \alpha_-\,|\alpha_x,\alpha_y\rangle\,, \tag{XIII.335}$$

con

$$\alpha_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha_x - i\alpha_y\right), \quad \alpha_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha_x + i\alpha_y\right). \tag{XIII.336}$$

Estos resultados muestran que los estados propios $|\alpha_x, \alpha_y\rangle$ son también eigenestados de $\hat{a}_+$ y $\hat{a}_-$, con eigenvalores α_+ y α_-, respectivamente. Denotando los vectores propios comunes de estos operadores con $|\alpha_+, \alpha_-\rangle$, sigue que (véase ejercicio XIII.46)

$$|\alpha_+, \alpha_-\rangle = \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} c_{n_x}(\alpha_x) c_{n_y}(\alpha_y) \left|\varphi_{n_+ n_-}\right\rangle . \tag{XIII.337}$$

Para determinar los valores esperados de las variables dinámicas en el tiempo t, puede emplearse la técnica usada con el problema XI.29, donde se mostró que basta hacer la sustitución $\alpha \to \alpha e^{-i\omega t}$ y multiplicar la función de onda resultante por $e^{-i\omega t/2}$ para obtener el estado en el tiempo t. Con este procedimiento se obtiene

$$\langle x(t)\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\, |\alpha_x| \cos\left(\omega t - \phi_x\right), \tag{XIII.338}$$

$$\langle y(t)\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\, |\alpha_y| \cos\left(\omega t - \phi_y\right), \tag{XIII.339}$$

$$\langle \hat{p}_x(t)\rangle = m\frac{d\,\langle x(t)\rangle}{dt}, \quad \langle \hat{p}_y(t)\rangle = m\frac{d\,\langle y(t)\rangle}{dt}, \tag{XIII.340}$$

$$\left\langle \hat{L}_z(t)\right\rangle = 2\hbar\, |\alpha_x|\, |\alpha_y| \operatorname{sen}\left(\phi_y - \phi_x\right). \tag{XIII.341}$$

Todos estos resultados coinciden con las correspondientes expresiones clásicas, como era de esperarse cuando se pone $|\alpha_x|^2 \cos^2\phi_x = m\omega \bar{x}^2_{0\text{clás}}/2\hbar$, etc.

Se tiene además que

$$\left\langle \hat{N}_x \hat{N}_y\right\rangle = \left\langle \hat{N}_x\right\rangle \left\langle \hat{N}_y\right\rangle ; \tag{XIII.342}$$

$$\left\langle \left(\Delta\hat{N}\right)^2\right\rangle = \left\langle \left(\Delta\hat{N}_x\right)^2\right\rangle + \left\langle \left(\Delta\hat{N}_y\right)^2\right\rangle = |\alpha_x|^2 + |\alpha_y|^2 ; \tag{XIII.343}$$

$$\left\langle \left(\Delta\hat{L}_z\right)^2\right\rangle = \left(|\alpha_x|^2 + |\alpha_y|^2\right)\hbar^2 = \left\langle \left(\Delta\hat{N}\right)^2\right\rangle \hbar^2; \tag{XIII.344}$$

$$\left\langle \left(\Delta\hat{H}\right)^2\right\rangle = \left(|\alpha_x|^2 + |\alpha_y|^2\right)\hbar^2\omega^2 = \left\langle \left(\Delta\hat{L}_z\right)^2\right\rangle \omega^2. \tag{XIII.345}$$

Como complemento véase el ejercicio XIII.47.

XIII.35 Determine el espectro energético del átomo hidrogenoide con ayuda del método WKB.

Los valores propios de la energía predichos por el método WKB se obtienen usando la fórmula general (T7.28), que escribimos en la forma

$$\oint p\, dr = 2\pi\hbar(k + \frac{1}{2}), \quad k = 0, 1, 2, \ldots, \tag{XIII.346}$$

en donde debemos poner, usando la ecuación (T13.20) para la función radial hidrogenoide (para $E < 0$),

$$p = \hbar\sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2} + \frac{2m_0 Z e^2}{\hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2}}, \tag{XIII.347}$$

o bien,

$$p = \hbar\sqrt{-A + \frac{2B}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}}, \quad A = \frac{2m_0\,|E|}{\hbar^2}, \quad B = \frac{m_0 Ze^2}{\hbar^2}. \tag{XIII.348}$$

Antes de continuar es importante hacer una corrección. El método WKB se puede aplicar directamente al problema central, pero resulta que la singularidad del integrando en el origen conduce a una aproximación muy pobre cuando se empatan las soluciones alrededor de un punto cercano al origen. Se puede mostrar[12] que la aproximación mejora sustancialmente para la mayoría de los potenciales usuales si en la expresión anterior para p se hace el cambio $l(l\,+\,1)$ $\rightarrow\ l(l+1) + {}^1\!/_4 = (l + {}^1\!/_2)^2$. Con este cambio, la ecuación que determina aproximadamente los valores propios de la energía queda

$$I \equiv \int_{r_-}^{r_+} \frac{dr}{r}\sqrt{-Ar^2 + 2Br - (l+\frac{1}{2})^2} = \pi(k+\frac{1}{2}), \tag{XIII.349}$$

en donde

$$r_\pm = \frac{1}{A}\left[B \pm \sqrt{B^2 - A(l+\frac{1}{2})^2}\right]. \tag{XIII.350}$$

La integral está tabulada, pero debe tenerse cuidado al evaluarla. Con $f(r) = ar^2 + br + c$, se tiene

$$\int \frac{\sqrt{f}}{r}dr = \sqrt{f} - \frac{\sqrt{c}}{2}\ln\frac{2c + br + 2\sqrt{cf}}{2c + br - 2\sqrt{cf}} + \frac{b}{4\sqrt{a}}\ln\frac{2ar + b + 2\sqrt{af}}{2ar + b - 2\sqrt{af}}. \tag{XIII.351}$$

Al sustituir los límites, para los cuales $f = 0$, hay que tomar en cuenta que, para $\beta \rightarrow +0$ debe tomarse[13]

$$\ln(\alpha + i\beta) = \ln|\alpha| + \begin{cases} 0, & \alpha > 0, \\ i\pi, & \alpha < 0; \end{cases} \tag{XIII.352}$$

$$\ln(\alpha - i\beta) = \ln|\alpha| + \begin{cases} i2\pi, & \alpha > 0, \\ i\pi, & \alpha < 0. \end{cases} \tag{XIII.353}$$

Evaluando la integral se obtiene

$$I = \pi\left(\frac{B}{\sqrt{A}} - (l+\frac{1}{2})\right) = \pi(k+\frac{1}{2}), \tag{XIII.354}$$

de donde se obtiene para la energía

$$E = -\frac{Z^2e^4m_0}{2\hbar^2(k+l+1)^2}. \tag{XIII.355}$$

Este resultado es exacto; de no haberse hecho el cambio $l(l+1) \rightarrow (l + {}^1\!/_2)^2$, se habría obtenido, en vez de $n = k + l + 1$ como número cuántico principal, la cantidad $k + {}^1\!/_2 + \sqrt{l(l+1)}$. Mejoras similares se obtienen con otros problemas, incluido el oscilador armónico isotrópico.

[12] El método fue sugerido por Kramers desde 1926; una discusión más detallada puede verse en A. Galindo y P. Pascual *Mecánica Cuántica* (Alhambra, Barcelona, 1978), sección 9.9.

[13] Alternativamente, pueden utilizarse las expresiones

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathrm{P}\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x),$$

en donde P representa la parte principal.

XIII.36 Determine el mínimo valor de $C > 0$ que garantiza que el potencial central $V = -C\delta(|\mathbf{r}| - a)$ soporta al menos un estado ligado.

La ecuación de Schrödinger reducida para la función radial $u(r)$ está dada por la ecuación (T13.24) y es

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[-C\delta(|\mathbf{r}| - a) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right] u = Eu. \tag{XIII.356}$$

Como se busca la condición para la existencia de al menos un estado ligado, de existir éste será claramente s, por lo que en la ecuación anterior debemos poner $l = 0$ y $E < 0$. Con esto, y para $r \neq a$, se obtiene

$$\frac{d^2u}{dr^2} - k^2u = 0, \quad k^2 = -2m_0E/\hbar^2. \tag{XIII.357}$$

Denotando con I la región con $r < a$ y con II la que corresponde a $r > a$, las soluciones que cumplen las condiciones de frontera apropiadas en $r \to 0$ y $r \to \infty$ son

$$u_I(r) = A \operatorname{senh} kr, \tag{XIII.358}$$

$$u_{II}(r) = Be^{-kr}. \tag{XIII.359}$$

La continuidad de $u(r)$ en $r = a$ da la relación

$$B = Ae^{ka} \operatorname{senh} ka, \tag{XIII.360}$$

y como A se determina de la condición de normalización, los parámetros de la solución quedan fijados, aunque resta aún garantizar la continuidad de la derivada de la función radial en $r = a$. Para determinar las consecuencias de esta última condición, procedemos de manera similar a como se hizo en el problema VI.3, es decir, integramos la ecuación radial alrededor del punto a, para obtener

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\frac{d^2u}{dr^2}dr - C\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\delta(|\mathbf{r}| - a)udr = E\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}udr, \tag{XIII.361}$$

es decir,

$$u'(a+\epsilon) - u'(a-\epsilon) = -\frac{2m_0C}{\hbar^2}u(a) + \mathcal{O}(\epsilon). \tag{XIII.362}$$

Pasando al límite $\epsilon \to 0$ queda

$$u'_{II}(a) - u'_I(a) = -\kappa u(a), \quad \kappa = \frac{2m_0C}{\hbar^2}. \tag{XIII.363}$$

Introduciendo aquí las ecuaciones (XIII.358)-(XIII.360) se obtiene

$$\coth ka = \frac{\kappa a}{ka} - 1. \tag{XIII.364}$$

Un análisis gráfico o numérico permite encontrar la solución de esta ecuación; pero es posible (y más rápido) reescribirla en la forma

$$x\,(\coth x + 1) = b, \quad x = ka, \quad b = \kappa a,$$

y observar que la solución ocurre en la región cercana al origen, en la que se puede hacer la aproximación $\coth x \simeq 1/x$, lo que da $x = ka \simeq b - 1$. Puesto

que la x que resuelve el problema debe ser positiva, sigue que debe cumplirse que $b = \kappa a > 1$, lo que equivale a

$$C > \frac{\hbar^2}{2m_0 a}. \tag{XIII.365}$$

Como era de esperarse, si el pozo no es suficientemente profundo no es capaz de producir estados ligados.

* **XIII.37** Demuestre que si G representa la corriente orbital debida al flujo de partículas, dada por $G = \int_S j_\varphi d^2s$, la cantidad $\tau = G^{-1}$ puede considerarse como el periodo medio asociado al movimiento orbital.[14]

En el problema ilustrativo 12.3 del texto se muestra que en los problemas con simetría central la densidad de corriente asociada al flujo de partículas es puramente ecuatorial (en la dirección del vector $\hat{\mathbf{a}}_\varphi$) y tiene el valor

$$j_\varphi = \frac{\hbar}{m_0}\frac{\rho(r,\theta)}{r\,\mathrm{sen}\,\theta}m, \tag{XIII.366}$$

en donde $\rho(r,\theta) \equiv \rho_{nl}(r,\theta) = |\psi_{nlm}|^2$ es la densidad local de partículas. La corriente total se obtiene integrando esta densidad sobre un plano P perpendicular al flujo, es decir, en la dirección $\hat{\mathbf{a}}_\varphi$:

$$\begin{aligned} G &= \int_{\mathrm{P}} j_\varphi d^2s = m\frac{\hbar}{m_0}\int\int_{\mathrm{P}}\frac{\rho(r,\theta)}{r\,\mathrm{sen}\,\theta}r\,dr\,d\theta \\ &= m\frac{\hbar}{2\pi m_0}\int\int\int\frac{\rho(r,\theta)}{r^2\,\mathrm{sen}^2\,\theta}r^2\,dr\,\mathrm{sen}\,\theta\,d\theta\,d\varphi \\ &= \frac{\hbar}{2\pi m_0}\left\langle\frac{1}{r^2\,\mathrm{sen}^2\,\theta}\right\rangle m, \end{aligned} \tag{XIII.367}$$

es decir,

$$G = \frac{\hbar}{2\pi m_0}\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle\left\langle\frac{1}{\mathrm{sen}^2\,\theta}\right\rangle m. \tag{XIII.368}$$

El valor de $\langle r^{-2}\rangle$ lo tomamos de (XIII.147) para obtener (con una notación simplificada y un tanto abusiva)

$$G = \frac{1}{\pi\hbar}\frac{m}{2l+1}\left\langle\frac{1}{\mathrm{sen}^2\,\theta}\right\rangle\left[\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial\lambda}\right]_{\lambda=l}. \tag{XIII.369}$$

Para determinar $\langle\mathrm{sen}^{-2}\,\theta\rangle$ podemos proceder como sigue: Consideramos la generalización del operador $\hat{\mathbf{L}}^2 \to \hat{\mathbf{\Lambda}}^2$ al caso $l \to \lambda$, $m \to \mu$, $\mu \geq 0$. En tal caso, $\hat{\mathbf{\Lambda}}^2$ tiene la forma (compárese con la ecuación (T12.36))

$$\hat{\mathbf{\Lambda}}^2 = \hat{\mathbf{\Lambda}}_1^2(\theta) - \frac{1}{\mathrm{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \to \hat{\mathbf{\Lambda}}_1^2(\theta) + \frac{\mu^2}{\mathrm{sen}^2\,\theta}, \tag{XIII.370}$$

y sus eigenfunciones son las funciones de Legendre con valores propios $(p+\mu)(p+\mu+1)$, con $p = 0, 1, 2, \ldots$ Una aplicación del teorema de Feynman-Hellman (ecuación (XIII.145)) da

$$\left\langle\frac{\partial\hat{\mathbf{\Lambda}}^2}{\partial\mu}\right\rangle = \left\langle\frac{2\mu}{\mathrm{sen}^2\,\theta}\right\rangle = \frac{\partial}{\partial\mu}(p+\mu)(p+\mu+1) = 2(p+\mu)+1. \tag{XIII.371}$$

[14] Esta definición y su discusión se encuentra en J.-M. Lévy-Leblond, *Am. J. Phys.* **55** (1987) 146.

Para retornar al caso cuántico debemos hacer $p + \mu \to l$, $\mu \to |m|$, con lo que se obtiene

$$\left\langle \frac{1}{\operatorname{sen}^2 \theta} \right\rangle = \frac{2l+1}{2\,|m|}. \tag{XIII.372}$$

Combinando este resultado con (XIII.369) se obtiene la fórmula (para $m > 0$)

$$G = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\partial E_n(l)}{\partial l}. \tag{XIII.373}$$

El significado del análogo clásico de la corriente G es el de número de veces que las partículas circulan alrededor del eje Oz en la unidad de tiempo, por lo que su inversa equivale al periodo orbital $\tau_{\text{clás}}$. Transportando esta interpretación al caso cuántico se obtiene para el periodo, definido como

$$\tau = G^{-1}, \tag{XIII.374}$$

$$\tau = 2\pi\hbar \left[\frac{\partial E_n(l)}{\partial l} \right]^{-1}, \tag{XIII.375}$$

o bien, con $L = \hbar l$,

$$\frac{\partial E_n(L)}{\partial L} = \frac{2\pi}{\tau} = \Omega_{nl}, \tag{XIII.376}$$

donde Ω_{nl} representa al análogo de la frecuencia orbital.

Para verificar que estos resultados tienen sentido, los aplicamos a dos casos simples, pero de interés. Para el oscilador armónico isotrópico se tiene $E_{kl} = (2k + l + 1)\hbar\omega = (2k + 1)\hbar\omega + L\omega$, y queda

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega}, \quad \Omega_{kl} = \omega. \tag{XIII.377}$$

Para el átomo hidrogenoide, $E_{kl} = -(m_0 Z^2 e^4/2\hbar^2)(k + l + 1)^{-2}$, y se obtiene

$$\tau_{nl} = \pi \sqrt{\frac{m_0}{2\,|E_{nl}|^3}} Ze^2, \quad \Omega_{nl}^2 = \frac{8\,|E_{nl}|^3}{m_0 Z^2 e^4}. \tag{XIII.378}$$

En ambos casos se obtiene exactamente la relación clásica correspondiente; aunque para el oscilador esto era de esperarse, no deja de ser interesante que la coincidencia ocurra también para el átomo hidrogenoide. La razón la encontramos en que la ecuación (XIII.376) puede leerse poniendo $\hbar l = J_\varphi =$ [la variable de acción conjugada al ángulo φ], precisamente como el análogo para la ecuación clásica para la(s) frecuencia(s), usual en la teoría de sistemas separables descritos en términos de variables acción-ángulo, es decir,

$$\Omega_{nl} = \frac{\partial \langle H(J_\varphi) \rangle}{\partial J_\varphi}. \tag{XIII.379}$$

La única diferencia aparente ocurre en la necesidad de tomar el promedio en el presente caso, lo que no cambia la naturaleza de la definición, aunque sí muestra que tanto la frecuencia como el periodo definidos con la ecuación (XIII.376) son de naturaleza estadística.

XIII.3. Ejercicios

XIII.38 Complete el conjunto de ecuaciones de Heisenberg del problema XIII.1 con las ecuaciones para $\widehat{\dot{\mathbf{p}}}$ y $\widehat{\dot{\mathbf{P}}}$. Investigue en particular el caso $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$.

XIII.39 ¿Qué sucede si en el problema XIII.3 se escoge la solución

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A \exp\left[i\left(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2\right)\right],$$

en vez de la dada por la ecuación (XIII.18)?

XIII.40 Demuestre que en presencia de un campo magnético se cumple que $m\hat{v}_i = \hat{p}_i - \frac{e}{c}A_i$, y que las velocidades $\hat{v}_i = \dot{x}_i$ satisfacen las reglas de conmutación

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_j] = \frac{ie\hbar}{m^2 c}\varepsilon_{ijk}B_k.$$

XIII.41 Verifique la ecuación (XIII.236).

XIII.42 Un oscilador tridimensional se halla en un estado con $m = 0$ que es superposición del estado base y un primer estado excitado. Determine, usando convenciones apropiadas, la superposición que maximiza $\langle z \rangle$.

XIII.43 Una partícula sin espín se mueve en un pozo esférico de profundidad V_0 y radio a. ¿Cuál es el máximo valor del momento angular para el que pueden existir estados ligados?

XIII.44 Compruebe que el grado de degeneración del nivel estacionario de un oscilador isotrópico bidimensional con energía $(N+1)\hbar\omega$ predicho por la ecuación (XIII.311) es $g_N = N + 1$.

XIII.45 Determine los operadores $\hat{a}_-, \hat{a}_-^\dagger$ para un oscilador isotrópico bidimensional (definidos en el problema XIII.33) en la representación r, φ. Demuestre que

$$\psi_{0,n_-}(\xi, \varphi) = \frac{1}{\beta\sqrt{\pi n_-!}} e^{-in_-\varphi} \xi^{n_-} e^{-\xi^2/2}$$

y construya las funciones de onda $\psi_{n_+,n_-}(\xi, \varphi)$ que describen los estados $(n, m) = (1, \pm 1)$, $(2, \pm 2)$, $(2, 0)$.

XIII.46 Derive detalladamente la ecuación (XIII.337).

XIII.47 Derive detalladamente las ecuaciones (XIII.338)–(XIII.345) y discuta estos resultados.

XIII.48 Demuestre que $\hat{\mathbf{p}}^2 = (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \hat{\mathbf{J}}^2/\mathbf{r}^2$.

XIII.49 Demuestre que la ecuación (XIII.372) equivale a la siguiente fórmula integral para los polinomios de Legendre:

$$\int_{-1}^{1} \left[P_l^m(x)\right]^2 \frac{dx}{1-x^2} = \frac{1}{m}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}, \quad m = 1, 2, \ldots, l.$$

XIII.50 Calcule la probabilidad de que en un átomo de hidrógeno en su estado base el electrón y el protón se separen más allá del valor permitido por la mecánica clásica a la misma energía.

XIII.51 Calcule la probabilidad de que el electrón de un átomo de hidrógeno en el estado ψ_{200} se encuentre a una distancia del núcleo menor que el radio de Bohr.

XIII.52 Compare los valores de $\langle r \rangle$, $\langle r^{-2} \rangle$ y $\langle r^{-3} \rangle$ para el átomo de hidrógeno con los promedios temporales obtenidos en la teoría de Bohr.

XIII.53 Encuentre una expresión para $\langle r^{-2} \rangle$ utilizando la ecuación radial de Schrödinger para R_{nl}.

XIII.54 Utilizando la relación de Kramers demostrada en el problema XIII.14, calcule $\langle r^{-3} \rangle$ y $\langle r^{-4} \rangle$ a partir del valor obtenido para $\langle r^{-2} \rangle$ en el problema XIII.13.

XIII.55 Suponga que la solución de la ecuación de Schrödinger radial para el átomo hidrogenoide puede escribirse en la forma

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\rho} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n$$

y determine la relación de recurrencia satisfecha por los coeficientes a_n. Verifique que las soluciones conocidas satisfacen esta relación.

XIII.56 Un electrón en el campo coulombiano de un protón en reposo se encuentra en el estado descrito por la función de onda

$$\psi = \frac{1}{6}\left[4\psi_{100}(\mathbf{r}) + 3\psi_{211}(\mathbf{r}) - \psi_{210}(\mathbf{r}) + \sqrt{10}\psi_{21-1}(\mathbf{r})\right].$$

Determine el valor esperado de la energía, de $\hat{\mathbf{L}}^2$ y de $\hat{L}_z$.

XIII.57 Un átomo de hidrógeno se encuentra en el estado $n = 2$, $l = 1$, $m = 0$. Exprese la correspondiente función de onda electrónica en el espacio de momentos.

XIII.58 Compare la energía liberada durante la transición $n = 2 \rightarrow n = 1$ en un átomo de hidrógeno, uno de deuterio y un ión He^{3+}.

XIII.59 Determine para cada uno de los tres casos del problema anterior la corrección a la energía de transición debida al retroceso del núcleo.

XIII.60 Determine la función de onda normalizada en coordenadas parabólicas para un átomo de hidrógeno con $n = 2$, $m = 0$; exprese la solución como una combinación lineal de las funciones de onda correspondientes, escritas en coordenadas esféricas.

XIII.61 Resuelva el problema del átomo de hidrógeno empleando un sistema de coordenadas parabólicas.

XIII.62 Determine la longitud de onda de las tres líneas Zeeman producidas en la transición $3d \rightarrow 2p$ de un átomo de hidrógeno colocado en un campo magnético de 10^4 gauss.

XIII.63 Considere una partícula ligada a un pozo esférico de radio a y profundidad V_0. Determine el mínimo valor que debe tener V_0 para que exista un estado ligado de energía y momento angular nulos.

XIII.64 Un electrón está atrapado dentro de una esfera rígida de radio R, y se encuentra en su estado base. Determine la presión que ejerce sobre la superficie de la esfera. *Sugerencia*: considere una pequeña expansión de la esfera.

XIII.65 El isótopo H^3, llamado tritio, decae espontáneamente, emitiendo un electrón con energía máxima de 17 keV; en este decaimiento β el núcleo se transforma en He^3 y el átomo resultante queda ionizado una vez. Determine la probabilidad de que, al decaer un átomo de tritio en su estado base, el ion de helio producido quede en un estado con número cuántico principal $n = 2$. Desprecie el retroceso atómico y cualquier efecto del electrón emitido sobre el ion.

XIII.66 Considere el estado hidrogenoide con números cuánticos n, $l = n - 1$, $m = l$. Para n grande puede considerarse que este estado corresponde a la descripción de un átomo de Bohr en una órbita circular. Demuestre que para $n \gg 1$ en efecto la distribución radial $|R_{nl}(r)|^2$ está fuertemente concentrada en un rango radial alrededor del valor medio $r_n = \langle n| r |n\rangle = a_0 n(n + \frac{1}{2})$ y que la probabilidad angular $\left|Y_n^{n-1}(\theta, \varphi)\right|^2 \propto \operatorname{sen}^{2(n-1)} \theta$ está concentrada alrededor del plano ecuatorial $\theta = \pi/2$. (Nótese que el valor del número cuántico magnético es poco significativo.)

XIII.67 Utilice el método WKB para encontrar las eigenfunciones radiales para una partícula que se mueve en un campo con simetría esférica.

XIII.68 Un campo central da lugar a un espectro discreto de energías. Demuestre que el mínimo de la energía para una l dada se incrementa con l.

XIII.69 Determine los estados estacionarios de una partícula de masa m_0 en el potencial

$$V(r) = -2V_0 \left(\frac{a}{r} - \frac{a^2}{2r^2}\right), \quad a, V_0 > 0.$$

Nota:

En el estudio de las eigenfunciones radiales del átomo hidrogenoide se llega a la ecuación diferencial (T13.46),

$$\rho Q'' + [(2l + 1) - \rho] Q' + (n - l - 1)Q = 0,$$

en donde $\rho = \left(\sqrt{8m|E|}/\hbar\right) r$. Las soluciones de esta ecuación se escriben en forma que puede variar de autor en autor (la propia ecuación puede variar, pues están en uso varias definiciones alternas para la variable adimensional ρ), lo que demanda tener mucho cuidado al pasar de un texto a otro, y así evitar errores de transcripción.

En Abramowitz y Stegun (1965), Arfken (1985) y Gasiorowicz (1974), por ejemplo, así como en el texto, la solución se escribe en la forma

$$Q = Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho),$$

con el polinomo asociado de Laguerre dado por

$$L_n^m(\rho) = \frac{1}{n!} e^{\rho} \rho^{-m} \frac{d^n}{d\rho^n} \left(e^{-\rho} \rho^{n+m} \right).$$

De aquí sigue que

$$L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) = \sum_{s=0}^{n-l-1} (-1)^s \frac{(n+l)!}{s!(n-l-1-s)!(2l+1+s)!} \rho^s.$$

Por otro lado, en otros textos, como Condon y Shortley (1953), Landau y Lifshitz (1958), Schiff (1955) o Saxon (1968), se toma como solución

$$Q = L_{n+l}^{2l+1}(\rho),$$

con la definición

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{s=0}^{n-l-1} (-1)^{s+1} \frac{[(n+l)!]^2}{s!(n-l-1-s)!(2l+1+s)!} \rho^s.$$

Entre estas soluciones hay la relación

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \leftrightarrow -(n+l)! L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho).$$

Esta diferencia se refleja en la forma explícita que toman algunas de las propiedades de estas funciones; en particular, la constante de normalización de la función de onda en Abramowitz y Stegun, Arfken, de la Peña y Gasiorowicz es

$$C_{nl} = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(Z/a_0)^3 (n-l-1)!}{(n+l)!}},$$

mientras que en Condon y Shortley, Landau y Lifshitz, Saxon y Schiff, se tiene

$$C_{nl} = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(Z/a_0)^3 (n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}.$$

En otros casos, como Messiah (1961) y Merzbacher (1970), se utiliza la misma notación que la empleada en el texto, pues la solución se escribe como $L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$; sin embargo, las funciones son diferentes y están dadas por

$$\left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \right]_{\text{Messiah, Merzbacher}} = (n+l)! \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \right]_{\text{texto}}.$$

En este caso, la constante de normalización resulta

$$C_{nl} = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(Z/a_0)^3 (n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}.$$

De manera análoga, los polinomios asociados de Laguerre $L_n^k(x)$ se definieron en términos de los polinomios de Laguerre $L_n(x)$ mediante la expresión (XIII.86), $L_{q-p}^p(x) = (-1)^p \ (d^p/dx^p) \ L_q(x)$. Ésta es una convención usual en la literatura, pero no única, pues muchos autores prefieren escribir $L_q^p(x) = (-1)^p \ (d^p/dx^p) \ L_q(x)$, que corresponde aquí a L_{q-p}^p.

XIV. Métodos aproximados II: teoría de perturbaciones independientes del tiempo. Efecto Stark

XIV.1. Problemas del texto

XIV.1 El potencial de un oscilador anarmónico unidimensional se puede aproximar con la expresión

$$V_T = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \left[1 + \alpha\frac{x}{x_0} + \beta\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right],$$

donde $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Utilice la teoría de perturbaciones para determinar las correcciones a la energía a segundo orden y las funciones de onda a primer orden. Use sus resultados para calcular $\langle x\rangle$, $\langle \hat{p}\rangle$, $\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle$, y $\left\langle (\Delta\hat{p})^2 \right\rangle$.

El hamiltoniano del problema se puede escribir como

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \tag{XIV.1}$$

donde

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{XIV.2}$$

es el hamiltoniano del oscilador armónico unidimensional y

$$\hat{H}' \equiv V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2\alpha\frac{x^3}{x_0} + \frac{1}{2}m\omega^2\beta\frac{x^4}{x_0^2} \tag{XIV.3}$$

es el resto del hamiltoniano, que se tomará como una perturbación, suponiendo que α y β son parámetros suficientemente pequeños. Por tratarse de un problema unidimensional todos los estados son no degenerados y es posible aplicar la teoría de perturbaciones para sistemas sin degeneración. Las funciones propias de $\hat{H}_0$ están dadas por la ecuación (T11.30) (equivalente a las ecuaciones (XI.76) y (XI.77)) y son (con x_0 en vez de α_0)

$$\psi_n^{(0)} = \psi_n = \left(\sqrt{\pi}2^n n! x_0\right)^{-\frac{1}{2}} e^{-x^2/2x_0^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right); \tag{XIV.4}$$

a ellas corresponden las energías propias (T11.31) (o, lo que es equivalente, (XI.75))

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right). \tag{XIV.5}$$

Para obtener las correcciones de la energía a los diferentes órdenes de aproximación requeriremos los elementos de matriz del hamiltoniano de perturbación

$$V_{nn'} \equiv \langle n|\,\hat{H}'\,|n'\rangle = \tfrac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{\alpha}{x_0}\,\langle n|\,x^3\,|n'\rangle + \frac{\beta}{x_0^2}\,\langle n|\,x^4\,|n'\rangle\right). \tag{XIV.6}$$

Para calcular estos elementos utilizaremos los métodos del capítulo 11 que hacen uso de los operadores de creación y aniquilación. Partimos de la ecuación (XI.64)

$$x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right), \tag{XIV.7}$$

para obtener, usando repetidamente las ecuaciones (T11.43),

$$x\,|n\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle + \sqrt{n}\,|n-1\rangle\right), \tag{XIV.8}$$

$$x^2\,|n\rangle = \frac{x_0^2}{2}\Big(\sqrt{(n+1)\,(n+2)}\,|n+2\rangle + (2n+1)\,|n\rangle + \sqrt{n\,(n-1)}\,|n-2\rangle\Big), \tag{XIV.9}$$

$$x^3\,|n\rangle = \frac{x_0^3}{2\sqrt{2}}\Big[\sqrt{(n+1)\,(n+2)\,(n+3)}\,|n+3\rangle + 3\,(n+1)\,\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle + 3n\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n\,(n-1)\,(n-2)}\,|n-3\rangle\Big], \tag{XIV.10}$$

$$\begin{aligned} x^4\,|n\rangle = \frac{x_0^4}{4}\Big[&\sqrt{(n+1)\,(n+2)\,(n+3)\,(n+4)}\,|n+4\rangle \\ &+ (4n+6)\,\sqrt{(n+1)\,(n+2)}\,|n+2\rangle + \left(3n^2 + 3\,(n+1)^2\right)|n\rangle \\ &+ (4n-2)\,\sqrt{n\,(n-1)}\,|n-2\rangle \\ &+ \sqrt{n\,(n-1)\,(n-2)\,(n-3)}\,|n-4\rangle\Big]. \end{aligned} \tag{XIV.11}$$

Se tiene así que

$$\begin{aligned} V_{nn'} = \frac{\alpha\hbar\omega}{4\sqrt{2}}\Big\{&\sqrt{(n'+1)\,(n'+2)\,(n'+3)}\delta_{n,n'+3} \\ &+ 3\left(n'+1\right)^{3/2}\delta_{n,n'+1} + 3\left(n'\right)^{3/2}\delta_{n,n'-1} \\ &+ \sqrt{n'\,(n'-1)\,(n'-2)}\delta_{n,n'-3}\Big\} \\ &+ \frac{\beta}{8}\hbar\omega\Big\{\sqrt{(n'+1)\,(n'+2)\,(n'+3)\,(n'+4)}\delta_{n,n'+4} \\ &+ \left(4n'+6\right)\sqrt{(n'+1)\,(n'+2)}\delta_{n,n'+2} \\ &+ \left(3n'^2 + 3\left(n'+1\right)^2\right)\delta_{n,n'} \\ &+ \left(4n'-2\right)\sqrt{n'\,(n'-1)}\delta_{n,n'-2} \\ &+ \sqrt{n'\,(n'-1)\,(n'-2)\,(n'-3)}\delta_{n,n'-4}\Big\}. \end{aligned} \tag{XIV.12}$$

A primer orden de la teoría de perturbaciones la corrección a la energía está dada por la ecuación (T14.13)

$$\delta E_n^{(1)} = \Big\langle n \mid \hat{H}' \mid n \Big\rangle = V_{nn}. \tag{XIV.13}$$

De (XIV.12) vemos que $\left\langle n \mid \hat{H}' \mid n \right\rangle$ contiene sólo un término, producido por la parte del potencial perturbativo proporcional a x^4; específicamente,

$$\delta E_n^{(1)} = \tfrac{3}{4}\beta\hbar\omega\left(n^2 + n + \tfrac{1}{2}\right). \tag{XIV.14}$$

Ésta es toda la corrección a la energía a primer orden de la teoría de perturbaciones. Más adelante, después de calcular las primeras correcciones a las funciones de onda, se determinarán las correcciones a la energía a segundo orden. El resultado anterior puede considerarse como una perturbación si (entre otras condiciones)

$$\frac{\delta E_n^{(1)}}{E_n^{(0)}} = \frac{3}{4}\beta\left(\frac{n^2}{n+\frac{1}{2}} + 1\right) \ll 1. \tag{XIV.15}$$

Para el estado base basta que $\frac{3}{4}\beta \ll 1$; pero para estados altamente excitados la condición se vuelve mucho más restrictiva, $\frac{3}{4}\beta n \ll 1$.

Con ayuda de las ecuaciones (T14.3) y (T14.11) escribimos las funciones de onda a primer orden (de la teoría de perturbaciones) en la forma

$$\Psi_n = \psi_n + \sum_l C_{nl}^{(1)}\psi_l, \tag{XIV.16}$$

con los coeficientes dados por la ecuación (T14.16),

$$C_{nl}^{(1)} = \frac{V_{l\,n}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}. \tag{XIV.17}$$

De (XIV.12) vemos que los únicos elementos de matriz del potencial perturbativo diferentes de cero que involucran al estado n, y las correspondientes correcciones a la función de onda, son los siguientes:

a) generados por la perturbación $\sim x^3$:

$$C_{n,n+3} = \frac{V_{n+3,n}}{-3\hbar\omega} = -\frac{\alpha}{12\sqrt{2}}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}; \tag{XIV.18}$$

$$C_{n,n+1} = \frac{V_{n+1,n}}{-\hbar\omega} = -\frac{\alpha}{4\sqrt{2}}3(n+1)\sqrt{n+1}; \tag{XIV.19}$$

$$C_{n,n-1} = \frac{V_{n-1,n}}{\hbar\omega} = \frac{\alpha}{4\sqrt{2}}3n\sqrt{n}; \tag{XIV.20}$$

$$C_{n,n-3} = \frac{V_{n-3,n}}{3\hbar\omega} = \frac{\alpha}{12\sqrt{2}}\sqrt{n(n-1)(n-2)}; \tag{XIV.21}$$

b) generados por la perturbación $\sim x^4$:

$$\begin{aligned} C_{n,n+4} &= \frac{V_{n+4,n}}{-4\hbar\omega} \\ &= -\frac{\beta}{32}\sqrt{(n+1)\,(n+2)\,(n+3)\,(n+4)}; \end{aligned} \tag{XIV.22}$$

$$C_{n,n+2} = \frac{V_{n+2,n}}{-2\hbar\omega} = -\frac{\beta}{16}\,(4n+6)\,\sqrt{(n+1)\,(n+2)}; \tag{XIV.23}$$

$$V_{n,n} = \frac{\beta}{8}\hbar\omega\left[3n^2 + 3\,(n+1)^2\right]; \tag{XIV.24}$$

$$C_{n,n-2} = \frac{V_{n-2,n}}{2\hbar\omega} = \frac{\beta}{16}\,(4n-2)\,\sqrt{n\,(n-1)}; \tag{XIV.25}$$

$$C_{n,n-4} = \frac{V_{n-4,n}}{4\hbar\omega} = \frac{\beta}{32}\sqrt{n\,(n-1)\,(n-2)\,(n-3)}. \tag{XIV.26}$$

La función de onda del estado n a primer orden de la teoría de perturbaciones resulta de esta manera

$$\begin{aligned}\Psi_n &= \psi_n + \frac{\alpha}{4\sqrt{2}}\left\{-\sqrt{(n+1)}\left[\tfrac{1}{3}\sqrt{(n+2)(n+3)}\psi_{n+3} + 3(n+1)\psi_{n+1}\right]\right.\\ &\quad \left. + \sqrt{n}\left[3n\psi_{n-1} + \tfrac{1}{3}\sqrt{(n-1)(n-2)}\psi_{n-3}\right]\right\}\\ &\quad + \frac{\beta}{8}\left\{\sqrt{n(n-1)}\left[\tfrac{1}{4}\sqrt{(n-2)(n-3)}\psi_{n-4} + (2n-1)\psi_{n-2}\right]\right.\\ &\quad - \sqrt{(n+1)(n+2)}\left[(2n+3)\psi_{n+2}\right.\\ &\quad \left.\left. + \tfrac{1}{4}\sqrt{(n+3)(n+4)}\psi_{n+4}\right]\right\}. \qquad \text{(XIV.27)}\end{aligned}$$

Con los resultados anteriores estamos en condiciones de calcular la corrección a la energía a segundo orden de la teoría de perturbaciones. Para hacer el cálculo empleamos la fórmula (T14.18),

$$\delta E_n^{(2)} = \sum_{n' \neq n} \frac{|V_{nn'}|^2}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}}. \qquad \text{(XIV.28)}$$

Sustituyendo los valores de los elementos de matriz diferentes de cero y simplificando se obtiene

$$\begin{aligned}\delta E_n^{(2)} &= \frac{\alpha^2\hbar\omega}{32}\left[-\tfrac{1}{3}(n+1)(n+2)(n+3) - 9(n+1)^3\right.\\ &\quad \left. + 9n^3 + \tfrac{1}{3}n(n-1)(n-2)\right]\\ &\quad + \frac{1}{64}\beta^2\hbar\omega\left[\tfrac{1}{4}n(n-1)(n-2)(n-3) + \tfrac{1}{2}(4n-2)^2 n(n-1)\right.\\ &\quad \left. - \tfrac{1}{2}(4n+6)^2(n+1)(n+2) - \tfrac{1}{4}(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)\right],\end{aligned}$$

es decir,

$$\delta E_n^{(2)} = -\tfrac{15}{16}\alpha^2\hbar\omega\left(n^2 + n + \tfrac{11}{30}\right) - \tfrac{1}{32}\beta^2\hbar\omega\left(34n^3 + 51n^2 + 59n + 21\right). \qquad \text{(XIV.29)}$$

Como era de esperarse, esta corrección resulta negativa para todos los niveles.

Calcularemos ahora los valores esperados solicitados con ayuda de la función de onda corregida hasta primer orden. Utilizando las expresiones (XIV.8) y (XIV.9) se obtiene a este orden,

$$\begin{aligned}x\Psi_n &= \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left\{\sqrt{n+1}\psi_{n+1} + \sqrt{n}\psi_{n-1}\right.\\ &\quad + \frac{\alpha}{12\sqrt{2}}\left[-\sqrt{(n+1)(n+2)}\right.\\ &\quad \times\left(\sqrt{(n+3)(n+4)}\psi_{n+4} + (10n+12)\psi_{n+2}\right)\\ &\quad - 9(2n+1)\psi_n + \sqrt{n(n-1)}\\ &\quad \left.\left.\times\left((10n+12)\psi_{n-2} + \sqrt{(n-2)(n-3)}\psi_{n-4}\right)\right]\right.\\ &\quad + \frac{\beta}{32}\left[-\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)(n+5)}\psi_{n+5}\right.\\ &\quad - (9n+16)\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\psi_{n+3}\\ &\quad \left. - 4(2n+3)(n+2)\sqrt{n+1}\psi_{n+1}\right.\end{aligned}$$

$$+ 4\,(2n-1)\,(n-1)\,\sqrt{n}\psi_{n-1} + (9n-7)\,\sqrt{n\,(n-1)\,(n-2)}\psi_{n-3}$$
$$+ \sqrt{n\,(n-1)\,(n-2)\,(n-3)\,(n-4)}\psi_{n-5}\Big]\Big\}\,, \qquad \text{(XIV.30)}$$

$$\begin{aligned} x^2\Psi_n \;=\; & \frac{x_0^2}{2}\Big\{\sqrt{(n+1)\,(n+2)}\psi_{n+2} + (2n+1)\,\psi_n + \sqrt{n\,(n-1)}\psi_{n-2} \\ & + \frac{\alpha}{12\sqrt{2}}\Big[-\sqrt{(n+1)\,(n+2)\,(n+3)\,(n+4)\,(n+5)}\psi_{n+5} \\ & - (11n+16)\,\sqrt{(n+1)\,(n+2)\,(n+3)}\psi_{n+3} \\ & - \left(10n^2+50n+33\right)\sqrt{n+1}\psi_{n+1} \\ & + \left(10n^2-30n-7\right)\sqrt{n}\psi_{n-1} + (11n-5)\,\sqrt{n\,(n-1)\,(n-2)}\psi_{n-3} \\ & + \sqrt{n\,(n-1)\,(n-2)\,(n-3)\,(n-4)}\psi_{n-5}\Big] \\ & + \frac{\beta}{32}\Big[-\sqrt{(n+1)\,(n+2)\,(n+3)\,(n+4)\,(n+5)\,(n+6)}\psi_{n+6} \\ & - (10n+21)\,\sqrt{(n+1)\,(n+2)\,(n+3)\,(n+4)}\psi_{n+4} \\ & - \left(17n^2+71n+72\right)\sqrt{(n+1)\,(n+2)}\psi_{n+2} \\ & - 4\left(12n^2+12n+6\right)\psi_n + \left(17n^2-37n+18\right)\sqrt{n\,(n-1)}\psi_{n-2} \\ & + (10n-11)\,\sqrt{n\,(n-1)\,(n-2)\,(n-3)}\psi_{n-4} \\ & + \sqrt{(n-1)\,(n-2)\,(n-3)\,(n-4)\,(n-5)}\psi_{n-6}\Big]\Big\}\,. \qquad \text{(XIV.31)} \end{aligned}$$

De estas expresiones sigue para el valor esperado de x

$$\langle\Psi_n\,|x|\,\Psi_n\rangle = \tfrac{3}{8}x_0\left[\alpha\left(n^2-3n-2\right) + \tfrac{1}{8}\alpha\beta\left(9n^4+18n^3+59n^2+50n+\tfrac{52}{3}\right)\right].$$

Sin embargo, la contribución proporcional a $\alpha\beta$ no es confiable, pues las funciones de onda a segundo orden pueden contener términos que generen contribuciones adicionales de esta naturaleza. La conclusión firme que podemos extraer es que el valor esperado de x, calculado hasta primer orden de la teoría de perturbaciones, es

$$\langle\Psi_n\,|x|\,\Psi_n\rangle = \tfrac{3}{8}x_0\alpha\left(n^2-3n-2\right). \qquad \text{(XIV.32)}$$

De forma análoga se obtiene para el valor esperado de x^2 calculado a primer orden (de la teoría de perturbaciones), es decir, suprimiendo todos los términos no lineales en α y β,

$$\left\langle\Psi_n\left|x^2\right|\Psi_n\right\rangle = x_0^2\left[\left(n+\tfrac{1}{2}\right) + \tfrac{3}{4}\beta\left(n^2+n+\tfrac{1}{2}\right)\right]. \qquad \text{(XIV.33)}$$

La variancia o dispersión de la variable de posición resulta a este orden de aproximación

$$\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = x_0^2\left[\left(n+\tfrac{1}{2}\right) + \tfrac{3}{4}\beta\left(n^2+n+\tfrac{1}{2}\right)\right]. \qquad \text{(XIV.34)}$$

El cálculo análogo para el momento se puede hacer partiendo de la expresión

$$\hat{p} = \frac{i\hbar}{x_0\sqrt{2}}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right),$$

la que conduce a

$$\hat{p}\Psi_n \;=\; \frac{i\hbar}{x_0\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1}\psi_{n+1} - \sqrt{n}\psi_{n-1}\right)$$

$$
\begin{aligned}
&+\frac{i\hbar}{x_0\sqrt{2}}\left\{\frac{\alpha}{12\sqrt{2}}\left[-\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}\psi_{n+4}\right.\right.\\
&-(8n+6)\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}+9\left(2n^2+2n+1\right)\psi_n\\
&-(8n+2)\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}\\
&\left.-\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}\psi_{n-4}\right]\\
&+\frac{\beta}{32}\left[-\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)(n+5)}\psi_{n+5}\right.\\
&-(7n+8)\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\psi_{n+3}\\
&+4(2n+3)(n+2)\sqrt{n+1}\psi_{n+1}\\
&+4(2n-1)(n-1)\sqrt{n}\psi_{n-1}\\
&+(1-7n)\sqrt{n(n-1)(n-2)}\psi_{n-3}\\
&\left.\left.-\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)}\psi_{n-5}\right]\right\}, \qquad \text{(XIV.35)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{p}^2\Psi_n \;=\; &-\frac{\hbar^2}{2x_0^2}\left\{\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}-(2n+1)\psi_n\right.\\
&\quad+\sqrt{n(n-2)}\psi_{n-2}\\
&+\frac{\alpha}{12\sqrt{2}}\left[-\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)(n+5)}\psi_{n+5}\right.\\
&-(7n+2)\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\psi_{n+3}\\
&+\left(26n^2+40n+21\right)\sqrt{n+1}\psi_{n+1}\\
&-\left(26n^2+12n+7\right)\sqrt{n}\psi_{n-1}+(7n+5)\sqrt{n(n-1)(n-2)}\psi_{n-3}\\
&\left.+\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)}\psi_{n-5}\right]\\
&+\frac{\beta}{32}\left[-\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)(n+5)(n+6)}\psi_{n+6}\right.\\
&-(6n+3)\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}\psi_{n+4}\\
&+\left(15n^2+57n+48\right)\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}\\
&-24\left(2n^2+2n+1\right)\psi_n-\left(15n^2-27n+6\right)\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}\\
&+(6n+3)\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}\psi_{n-4}\\
&\left.\left.+\sqrt{(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)(n-5)}\psi_{n-6}\right]\right\}. \qquad \text{(XIV.36)}
\end{aligned}
$$

Los correspondientes valores esperados a primer orden resultan

$$\langle\Psi_n\,|\hat{p}|\,\Psi_n\rangle=-\frac{i\hbar}{x_0}\frac{3}{4}\alpha\left(n^2+n+\tfrac{1}{2}\right), \qquad \text{(XIV.37)}$$

$$\left\langle\Psi_n\left|\hat{p}^2\right|\Psi_n\right\rangle=\frac{\hbar^2}{x_0^2}\left[\left(n+\tfrac{1}{2}\right)+\tfrac{3}{4}\beta\left(n^2+n+\tfrac{1}{2}\right)\right]. \qquad \text{(XIV.38)}$$

Finalmente, para la variancia del operador de momento se obtiene

$$
\begin{aligned}
\left\langle(\Delta\hat{p})^2\right\rangle \;&=\; \langle\hat{p}^2\rangle-\langle\hat{p}\rangle^2\\
&=\; \frac{\hbar^2}{x_0^2}\left[\left(n+\tfrac{1}{2}\right)+\tfrac{3}{4}\beta\left(n^2+n+\tfrac{1}{2}\right)\right]=\frac{\hbar^2}{x_0^4}\left\langle(\Delta\hat{x})^2\right\rangle. \qquad \text{(XIV.39)}
\end{aligned}
$$

En el cálculo anterior hemos considerado la función de onda corregida a primer orden y mantenido explícitamente todos los términos que aparecen en varios de

los cálculos, lo que hace el cálculo simple, pero laborioso. Con el resultado del siguiente problema se puede simplificar un tanto el procedimiento.

XIV.2 Demuestre que si f es una variable dinámica de un sistema cuántico, sus elementos de matriz determinados a primer orden de la teoría de perturbaciones son

$$f_{nm} = f_{nm}^{(0)} + \sum_{k\neq n} \frac{V_{kn} f_{km}^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_{k\neq m} \frac{V_{km} f_{nk}^{(0)}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}. \tag{XIV.40}$$

¿Cuándo es aplicable este resultado?

A primer orden de la teoría de perturbaciones la función de onda está dada por la ecuación (XIV.16). Con su ayuda se obtiene para los elementos de matriz f_{nm} de una variable dinámica genérica $\hat{f}$ del sistema, conservando en el desarrollo términos hasta primer orden,

$$\begin{aligned} f_{nm} &= \langle \Psi_n | \, f \, | \Psi_m \rangle \\ &= \left\langle \psi_n^{(0)} + \sum_l C_{nl}^{(1)} \psi_l^{(0)} \middle| \, \hat{f} \, \middle| \psi_m^{(0)} + \sum_k C_{mk}^{(1)} \psi_k^{(0)} \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \, f \, \middle| \psi_m^{(0)} \right\rangle + \sum_k C_{mk}^{(1)} \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \, f \, \middle| \psi_k^{(0)} \right\rangle \\ &\quad + \sum_l C_{nl}^{(1)} \left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \, f \, \middle| \psi_m^{(0)} \right\rangle, \end{aligned}$$

es decir,

$$f_{nm} = f_{nm}^{(0)} + \sum_k C_{mk}^{(1)} f_{nk}^{(0)} + \sum_l C_{nl}^{(1)} f_{lm}^{(0)}. \tag{XIV.41}$$

Recordando que a primer orden es posible tomar $C_{nn}^{(1)} = 0$ (ecuación (T14.12)), se tiene

$$f_{nm} = f_{nm}^{(0)} + \sum_{k\neq m} C_{mk}^{(1)} f_{nk}^{(0)} + \sum_{l\neq n} C_{nl}^{(1)} f_{lm}^{(0)},$$

o mejor,

$$f_{nm} = f_{nm}^{(0)} + \sum_{k\neq m} C_{mk}^{(1)} f_{nk}^{(0)} + \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)} f_{km}^{(0)}. \tag{XIV.42}$$

Si aquí se utiliza la fórmula (XIV.17) se obtiene que, hasta primer orden de la teoría de perturbaciones, los elementos de matriz de una variable dinámica genérica pueden escribirse en la forma

$$f_{nm} = f_{nm}^{(0)} + \sum_{k\neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} f_{km}^{(0)} + \sum_{k\neq m} \frac{V_{km}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}} f_{nk}^{(0)}. \tag{XIV.43}$$

Es claro que este resultado sólo puede aplicarse cuando los niveles n, m no son degenerados, y sus energías están suficientemente separadas de las de cualquier posible estado intermedio k, de tal forma que ninguno de los denominadores $E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$ o $E_m^{(0)} - E_k^{(0)}$ se hace tan pequeño como para que los términos de corrección dejen de ser pequeños respecto a $f_{nm}^{(0)}$.

En particular, para el valor esperado en el estado n se obtiene (tomamos en cuenta que $f_{nk} = f_{kn}^*$)

$$f_{nn} = f_{nn}^{(0)} + \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \left(f_{nk}^{(0)} + f_{nk}^{(0)*} \right), \tag{XIV.44}$$

mientras que para las variables dinámicas con matriz diagonal (las integrales de movimiento) sigue de (XIV.43) que

$$f_{nm} = f_{nm}^{(0)} + \frac{f_{mm}^{(0)} V_{mn} - f_{nn}^{(0)} V_{nm}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \tag{XIV.45}$$

Vemos que para todas las integrales de movimiento se obtiene hasta primer orden

$$f_{nn} = f_{nn}^{(0)}. \tag{XIV.46}$$

Este resultado generaliza el obtenido previamente para la energía, ecuación (T14.13).

XIV.3 Una partícula se mueve sobre una circunferencia vertical de radio R; despreciando los efectos de fricción, pero tomando en cuenta la fuerza de gravedad, el hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2m_0 R^2} + m_0 g R \operatorname{sen} \varphi.$$

Determine las soluciones no perturbadas, así como las correcciones a la energía a primer y segundo órdenes, tratando al término gravitatorio como una perturbación. ¿Bajo qué condiciones es válida esta solución?

El hamiltoniano del problema puede escribirse como

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \tag{XIV.47}$$

donde

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{L}_z^2}{2m_0 R^2}, \quad \hat{V} = m_0 g R \operatorname{sen} \varphi. \tag{XIV.48}$$

Si se supone que el término gravitatorio $\hat{V}$ es pequeño en comparación con la parte del hamiltoniano asociada a la energía cinética debida a la rotación, se le puede tomar como una perturbación, y el problema con hamiltoniano $\hat{H}_0$ se convierte en el no perturbado. Como

$$\hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \tag{XIV.49}$$

la ecuación de eigenvalores para este último problema toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0 R^2} \frac{\partial^2 \psi_m^{(0)}}{\partial \varphi^2} = E_m^{(0)} \psi_m^{(0)}. \tag{XIV.50}$$

Las eigenfunciones son

$$\psi_m^{(0)} = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{XIV.51}$$

con los correspondientes eigenvalores

$$E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2 m^2}{2m_0 R^2}. \tag{XIV.52}$$

Nótese que sólo el estado base, que corresponde a $m = 0$, es no degenerado; todos los otros estados presentan doble degeneración. Por ello, para determinar los efectos del término gravitatorio será necesario utilizar la teoría de perturbaciones para sistemas con degeneración.

Los elementos de matriz de la perturbación están dados por

$$\begin{aligned} V_{mm'} &= m_0 g R \int_0^{2\pi} \psi_m^{*(0)} \operatorname{sen}\varphi \, \psi_{m'}^{(0)} d\varphi = \frac{m_0 g R}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi} \operatorname{sen}\varphi \, d\varphi \\ &= \frac{m_0 g R}{2\pi} \frac{1}{2i} \int_0^{2\pi} \left(e^{i(m'-m+1)\varphi} - e^{i(m'-m-1)\varphi} \right) d\varphi \\ &= i \frac{m_0 g R}{2} \left(\delta_{m',m+1} - \delta_{m',m-1} \right); \end{aligned} \tag{XIV.53}$$

por lo tanto, los elementos de matriz diferentes de cero son

$$V_{m,m+1} = i\tfrac{1}{2} m_0 g R, \quad V_{m,m-1} = -i\tfrac{1}{2} m_0 g R. \tag{XIV.54}$$

La presencia de degeneración para $m \neq 0$ obliga a utilizar la teoría de perturbaciones para niveles degenerados, en principio; sin embargo, una circunstancia afortunada simplifica un tanto las cosas. Sucede que hasta segundo orden de la teoría de perturbaciones, que es la aproximación usada aquí, la degeneración se preserva (salvo para $m = \pm 1$, que son niveles que se desdoblan), por lo que se puede aplicar, hasta e incluyendo este orden, la teoría para estados no degenerados, como se hace a continuación. Esto significa, en particular, que las funciones $\psi_m^{(0)}$ dadas en (XIV.51) constituyen la base de funciones correctas a orden cero.

Como $\delta E_m^{(1)} = V_{mm} = 0$, no hay correcciones a primer orden. A segundo orden se obtiene

$$\delta E_m^{(2)} = \sum_{m' \neq m} \frac{|V_{mm'}|^2}{E_m^{(0)} - E_{m'}^{(0)}} = \frac{m_0^3 g^2 R^4}{2\hbar^2} \left[\frac{1}{m^2 - (m-1)^2} + \frac{1}{m^2 - (m+1)^2} \right]. \tag{XIV.55}$$

Introduciendo el momento de inercia del rotor $I = m_0 R^2$, se tiene hasta segundo orden de la teoría de perturbaciones

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I} m^2 + \frac{m_0 I^2 g^2}{\hbar^2} \frac{1}{4m^2 - 1}. \tag{XIV.56}$$

El resultado muestra que para $m \neq 0, \delta E_m^{(2)} > 0$, pero para $m = 0$, $\delta E_m^{(2)} < 0$. En otras palabras, los efectos del campo externo sobre la energía de la partícula en reposo (o, en el límite clásico, en rotación muy lenta) tienen signo opuesto a los que se obtienen cuando hay rotación. Sin embargo, las correcciones pierden importancia relativa conforme el número cuántico m aumenta.

En los ejercicios XIV.30 y XIV.31 se proponen variantes interesantes de este problema.

* **XIV.4** Una partícula cargada en presencia de un campo eléctrico uniforme y constreñida a moverse sobre una circunferencia sin fricción en el plano del campo eléctrico,

es un péndulo plano cuántico. Resuelva exactamente el problema del péndulo plano cuántico. Haga un estudio perturbativo de este problema a primer orden, empleando como hamiltoniano no perturbado:

a) el de un oscilador armónico,

b) el de un rotor rígido.

¿En qué caso es aceptable cada una de las soluciones anteriores?[1]

a) *Solución exacta.* La ecuación de Schrödinger es

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0l^2}\frac{d^2\psi}{d\theta^2} + m_0gl\,(1-\cos\theta)\,\psi = E\psi, \tag{XIV.57}$$

donde l representa la longitud del péndulo; para el caso eléctrico debe ponerse $m_0g \to -e\mathcal{E}$, con $\mathcal{E}$ el campo eléctrico. Con el cambio de variable $\theta = 2\varphi$ esta ecuación se puede escribir en la forma de la ecuación de Mathieu,

$$\frac{d^2\psi}{d\varphi^2} + (\eta + \gamma\cos 2\varphi)\,\psi = 0, \tag{XIV.58}$$

donde se puso

$$\eta + \gamma = \frac{8m_0l^2E}{\hbar^2}, \quad \gamma = \frac{8m_0^2l^3g}{\hbar^2}. \tag{XIV.59}$$

El caso $\gamma = 0$ (que corresponde a $g = 0$) posee solución inmediata en términos de las funciones $\operatorname{sen} 2\varphi$ y $\cos 2\varphi$, cuya necesaria invariancia frente al cambio $\varphi \to \varphi + \pi$ ($\theta \to \theta + 2\pi$) requiere que se cumpla que

$$\eta = 4n^2, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{XIV.60}$$

En este caso las funciones propias son

$$\psi = a\operatorname{sen}(2n+2)\,\varphi \quad \text{y} \quad \psi = b\cos 2n\varphi. \tag{XIV.61}$$

La consideración de $\gamma \neq 0$ complica los cálculos anteriores, pero los resultados finales se sintetizan como sigue (los detalles se pueden ver en el trabajo de Pradhan y Khare antes citado): Las eigenfunciones se convierten en las funciones de Mathieu $\mathrm{se}_{2n+2}(\gamma,\varphi)$ y $\mathrm{ce}_{2n}(\gamma,\varphi), n = 0, 1, 2, \ldots$, las cuales tienen a $\operatorname{sen}(2n+2)\,\varphi$ y $\cos 2n\varphi$ como límites cuando $\gamma \to 0$, respectivamente. A su vez, los correspondientes valores propios se convierten en funciones de γ, que cumplen con (XIV.60) cuando se toma $\gamma = 0$. No existen soluciones físicamente permitidas para $E < 0$, ni para funciones de Mathieu de orden impar, pues no satisfacen la condición de periodicidad en φ.

De la ecuación (XIV.58) sigue que en el límite $\gamma \to 0$ el sistema puede verse como un rotor plano, mientras que para $\gamma \to \infty$ se convierte en el de un oscilador no lineal, el que, para pequeñas amplitudes de oscilación, puede aproximarse por un oscilador lineal, como sigue de un desarrollo del coseno en potencias de θ, en la ecuación (XIV.57). Estudiaremos ahora estos dos casos límite con métodos perturbativos.

[1] Este problema fue resuelto inicialmente por E. U. Condon en 1928; el tratamiento perturbativo se desarrolla con detalle en T. Pradhan y A. V. Khare, *Am. J. Phys.* **41** (1973) 59.

b) *Solución perturbativa a partir de un rotor plano.* El hamiltoniano se separa en la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_\varphi^2}{8m_0l^2}, \quad \hat{H}' = m_0gl(1 - \cos 2\varphi), \tag{XIV.62}$$

para tratar a $\hat{H}'$ como una perturbación de $\hat{H}_0$, que representa un rotor rígido plano con momento de inercia $I = m_0l^2$. La correspondiente ecuación de Schrödinger sin perturbación es

$$-\frac{\hbar^2}{8m_0l^2}\frac{d^2u}{d\varphi^2} = E^{(0)}u, \tag{XIV.63}$$

con eigenfunciones

$$u_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{2im\varphi}; \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots \tag{XIV.64}$$

y eigenvalores (cf. la ecuación (XIV.52))

$$E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2m^2}{2m_0l^2}. \tag{XIV.65}$$

Conviene escribir los resultados anteriores en la forma

$$u_{\pm n}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{\pm 2in\varphi}; \quad E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2n^2}{2m_0l^2}, \quad n = |m| = 0, 1, 2, \ldots \tag{XIV.66}$$

Todos los niveles, a excepción de $n = 0$, son doblemente degenerados. Para $n = 0$ podemos aplicar la teoría de estados no degenerados, que da a primer y segundo orden de aproximación:

$$E_0^{(1)} = \langle 0|\, \hat{H}'\, |0\rangle = m_0gl\, \langle u_0|\, 1 - \cos 2\varphi\, |u_0\rangle = m_0gl, \tag{XIV.67}$$

$$E_0^{(2)} = \sum_{n' \neq 0} \frac{H'_{0n'}H'_{n'0}}{E_0^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} = -\frac{m_0^3g^2l^4}{\hbar^2} \tag{XIV.68}$$

(cf. la ecuación (XIV.56)). Para obtener este resultado se tomó en cuenta que los elementos de matriz no nulos son

$$H'_{0n_\pm} = \frac{m_0gl}{\pi}\int_0^\pi (1 - \cos 2\varphi)e^{\pm 2in\varphi}d\varphi = -\tfrac{1}{2}m_0gl\delta_{1n}, \tag{XIV.69}$$

por lo que hay dos contribuciones iguales que desplazan el nivel 0 hacia abajo. Para los niveles degenerados con $n \geq 1$ las correcciones a la energía están dadas por la ecuación secular

$$\begin{vmatrix} H'_{n_+n_+} - E^{(1)} & H'_{n_+n_-} \\ H'_{n_-n_+} & H'_{n_-n_-} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0. \tag{XIV.70}$$

El resto de elementos de matriz de $\hat{H}'$ se anulan. Los elementos de matriz requeridos son

$$H'_{n_+n_+} = \frac{m_0gl}{\pi}\int_0^\pi e^{-2in\varphi}(1 - \cos 2\varphi)e^{2in\varphi}d\varphi = m_0gl, \tag{XIV.71}$$

$$H'_{n_-n_-} = H'_{n_+n_+} = m_0 gl, \quad H'_{n_+n_-} = H'_{n_-n_+} = 0. \tag{XIV.72}$$

De aquí sigue que la ecuación secular posee una sola raíz doble, lo que corresponde a un desplazamiento uniforme de todos los niveles con $n \neq 0$ y la persistencia de la degeneración para ellos:

$$E_n^{(1)} = m_0 gl. \tag{XIV.73}$$

El efecto general de primer orden es desplazar los niveles del rotor uniformemente. Esta aproximación mantiene su validez mientras $\sqrt{2gl}\,(m_0 l/\hbar) \ll n$, y mejora con la excitación. La razón de este comportamiento se advierte de inmediato reescribiendo la ecuación (XIV.59) que da los valores exactos de la energía, en la forma

$$E_n = \frac{\hbar^2 \eta}{8 m_0 l^2} + m_0 gl \to E_n^{(0)} + m_0 gl. \tag{XIV.74}$$

El último resultado se escribió en la aproximación (XIV.60).

Para obtener el efecto Stark a segundo orden de los niveles degenerados deben encontrarse las raíces de la ecuación secular

$$\begin{vmatrix} \sum_{n' \neq n} \frac{H'_{n_+n'} H'_{n'n_+}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} - E^{(2)} & \sum_{n' \neq n} \frac{H'_{n_+n'} H'_{n'n_-}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \\ \sum_{n' \neq n} \frac{H'_{n_-n'} H'_{n'n_+}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} & \sum_{n' \neq n} \frac{H'_{n_-n'} H'_{n'n_-}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} - E^{(2)} \end{vmatrix} = 0. \tag{XIV.75}$$

Para los elementos de matriz requeridos se obtiene

$$H'_{nn'} = m_0 gl \left(\delta_{nn'} - \tfrac{1}{2} \delta_{n,n'\pm 1} \right) = -\tfrac{1}{2} m_0 gl \delta_{n,n'\pm 1}, \tag{XIV.76}$$

pues el caso $n = n'$ debe ser excluido. En la aplicación de estos resultados los casos $n = 1$ y $n > 1$ conducen a soluciones diferentes, por lo que debe analizárseles por separado. Para $n = 1$, la ecuación secular resulta

$$\begin{vmatrix} \left(m_0^3 g^2 l^4 / 3\hbar^2 \right) - E_1^{(2)} & m_0^3 g^2 l^4 / 2\hbar^2 \\ m_0^3 g^2 l^4 / 2\hbar^2 & \left(m_0^3 g^2 l^4 / 3\hbar^2 \right) - E_1^{(2)} \end{vmatrix} = 0, \tag{XIV.77}$$

con raíces

$$E_{1a}^{(2)} = -\frac{m_0^3 g^2 l^4}{6\hbar^2}, \quad E_{1b}^{(2)} = \frac{5 m_0^3 g^2 l^4}{6\hbar^2}. \tag{XIV.78}$$

El nivel $n = 1$ se ha desdoblado, rompiéndose su degeneración a partir del segundo orden de aproximación. Sin embargo, a este orden el resto de niveles mantiene su degeneración, pues el determinante secular toma la forma

$$\begin{vmatrix} \frac{\left| H'_{n_+,n_++1} \right|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} + \frac{\left| H'_{n_+,n_+-1} \right|^2}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}} - E^{(2)} & 0 \\ 0 & \frac{\left| H'_{n_-,n_-+1} \right|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} + \frac{\left| H'_{n_-,n_--1} \right|^2}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}} - E^{(2)} \end{vmatrix} = 0, \tag{XIV.79}$$

que conduce a la raíz múltiple única

$$\delta E_n^{(2)} = \frac{m_0^3 g^2 l^4}{(4n^2 - 1)\,\hbar^2}, \quad n > 1. \tag{XIV.80}$$

Las ecuaciones (XIV.68), (XIV.78) y (XIV.80) reflejan la corrección a η debida a su dependencia en γ a través de las funciones de Mathieu.

b) *Solución perturbativa a partir de un oscilador lineal.* Para describir estados que corresponden a movimientos de amplitudes pequeñas es conveniente descomponer el hamiltoniano en la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_\varphi^2}{8m_0l^2} + 2m_0gl\varphi^2, \quad \hat{H}' = m_0gl(1 - 2\varphi^2 - \cos 2\varphi). \tag{XIV.81}$$

Matemáticamente, la justificación de esta aproximación es que cuando $\gamma \to \infty$, los valores propios asociados a las funciones de Mathieu satisfacen la relación $\eta + \gamma = (2n+1)\sqrt{2\gamma}$, lo que corresponde por (XIV.59) al espectro de energías

$$E_n = \frac{(\eta+\gamma)\hbar^2}{8m_0l^2} = \hbar\sqrt{\frac{g}{l}}(n + \tfrac{1}{2}), \tag{XIV.82}$$

es decir, el de un oscilador armónico con frecuencia circular $\omega = \sqrt{g/l}$ (que es la de un péndulo clásico, como es de esperarse). Más aún, también sucede que en el límite $\gamma \to \infty$ las funciones de Mathieu $\mathrm{se}_{2n+2}(\gamma, \varphi)$ y $\mathrm{ce}_{2n}(\gamma, \varphi)$ tienden uniformemente a las funciones (T11.30) precisamente, que constituyen las funciones propias del oscilador armónico expresadas en términos de la variable

$$\xi = 2\left(m_0^2gl^3/\hbar^2\right)^{1/4}\varphi. \tag{XIV.83}$$

Reescribiendo ξ en la forma $\xi = 2\left(m_0^2g/\hbar^2l\right)^{1/4} l\varphi$, el coeficiente $\left(\hbar^2l/m_0^2g\right)^{1/4} = \sqrt{\hbar/m_0\omega} \equiv a$ aparece como una longitud característica del péndulo. En términos de esta variable el hamiltoniano de perturbación es

$$\hat{H}' = m_0gl\left(1 - \frac{2\xi^2}{\beta^2} - \cos\frac{2\xi}{\beta}\right), \quad \beta = (2\gamma)^{1/4}. \tag{XIV.84}$$

Como se trata de un oscilador unidimensional, ninguno de sus niveles es degenerado y se puede aplicar la teoría de perturbaciones directamente. La corrección a la energía a primer orden resulta así, con $|n\rangle$ un eigenvector del oscilador,

$$E_n^{(1)} = \langle n|\,\hat{H}'\,|n\rangle = m_0gl\left[1 - L_n\left(\frac{a^2}{2l^2}\right)\right] - \tfrac{1}{2}E_n^{(0)}, \tag{XIV.85}$$

en donde L_n representa un polinomio de Laguerre. De las definiciones anteriores es fácil verificar que $a^2/2l^2 = \sqrt{2/\gamma}$, por lo que en el límite $\gamma \to \infty$ que se está tratando aquí, el argumento del polinomio de Laguerre es muy pequeño comparado con la unidad y se puede aproximar esta función (usando (TA.52) con $p = 0$) con $L_n(x) = 1 - nx + {}^1\!/_4\, n(n-1)x^2$, $x = \hbar\omega/2m_0gl$. Resulta así

$$E_n^{(1)} = -\tfrac{1}{4}\hbar\omega\left[1 + \tfrac{1}{4}n(n-1)\frac{\hbar\omega}{m_0gl}\right]. \tag{XIV.86}$$

Para $\gamma \gg 1$ el segundo término del corchete es muy pequeño si la excitación no es excesiva; despreciando esta contribución, a primer orden de la teoría de perturbaciones todos los niveles del oscilador se desplazan hacia abajo por la cantidad fija $-{}^1\!/_4\,\hbar\omega$, es decir, pierden la mitad de su energía de punto cero.

XIV.5 Estudie el efecto Zeeman normal de partículas sin espín con los métodos de la teoría de perturbaciones.

El efecto Zeeman normal (es decir, para partículas sin espín) se da en átomos inmersos en un campo magnético uniforme y constante. En la aproximación lineal, el hamiltoniano del sistema está dado por la ecuación (T13.75)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{2m_0c}\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{L}}, \tag{XIV.87}$$

con $\hat{H}_0$ el hamiltoniano átomico en ausencia del campo magnético. Si tomamos la dirección Oz a lo largo del campo, el último término se simplifica y se obtiene

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{2m_0c}B\hat{L}_z. \tag{XIV.88}$$

Consideraremos la interacción con el campo magnético como una perturbación. Los estados atómicos no perturbados son estados propios del operador $\hat{L}_z$, por lo que podemos escribir $\hat{L}_z\,|nlm\rangle = \hbar m\,|nlm\rangle$; en general, se trata de estados degenerados, pues antes de la perturbación los niveles de energía no dependen del número cuántico m. Los elementos de matriz de la perturbación entre estos estados degenerados son

$$\left\langle nlm \mid \hat{H}' \mid nlm' \right\rangle = -\frac{em'}{2m_0c}B\hbar\left\langle nlm \mid nlm' \right\rangle = -\frac{e\hbar B}{2m_0c}m\delta_{m,m'} = \mu_0 Bm\delta_{m,m'}, \tag{XIV.89}$$

donde μ_0 es el magnetón de Bohr. Para aplicar la teoría de perturbaciones debemos en primer lugar resolver la ecuación secular (T14.45); sin embargo, puesto que los únicos términos que sobreviven se encuentran todos sobre la diagonal principal, el determinante se reduce a un producto de factores de la forma $H'_{mm} - \delta E^{(1)} = 0$, por lo que para cada nivel a primer orden se obtiene

$$\Delta E_{nlm} = \mu_0 Bm. \tag{XIV.90}$$

Este resultado coincide con lo expuesto en la sección 13.5 del texto.

XIV.6 Demuestre que la matriz $\hat{A}$ definida por la ecuación (T14.50) también satisface la condición $\hat{A}\hat{A}^\dagger = 1$, la cual, tomada junto con $\hat{A}^\dagger\hat{A} = 1$ demostrada en el texto, garantiza que $\hat{A}$ es unitaria.

La matriz $\hat{A}$ transforma los vectores de estado de orden cero que corresponden a un nivel degenerado en el conjunto correcto de vectores de estado, es decir, apropiado para iniciar el cálculo perturbativo. Para hacer la demostración solicitada podemos partir de la condición (T14.52), es decir, $\hat{A}^\dagger\hat{A} = 1$. Entonces de (T14.50), $\varphi = \hat{A}\psi$, sigue que

$$\hat{A}^\dagger\varphi = \hat{A}^\dagger\hat{A}\psi = \psi, \tag{XIV.91}$$

y, usando la propiedad de ortonormalidad de las $|\psi\rangle$,

$$\langle\psi \mid \psi\rangle = \left\langle \hat{A}^\dagger\varphi \mid \hat{A}^\dagger\varphi \right\rangle = \left\langle \varphi \mid \hat{A}\hat{A}^\dagger \mid \varphi \right\rangle = 1. \tag{XIV.92}$$

De aquí que deba tomarse

$$\hat{A}\hat{A}^\dagger = 1 \tag{XIV.93}$$

para garantizar que la nueva base sea ortonormal.

XIV.7 Explique la razón por la cual el efecto Stark lineal crece con el número cuántico principal n.

El potencial de perturbación en el efecto Stark se suele escribir como

$$\hat{V} = -e\mathcal{E} \cdot \hat{\mathbf{r}}, \tag{XIV.94}$$

donde $\mathcal{E}$ representa la intensidad del campo eléctrico uniforme y constante al cual se somete el átomo. Según la teoría de perturbaciones, el efecto Stark lineal ocurre sólo para los estados excitados del átomo de hidrógeno, pues son éstos los que presentan degeneración. El crecimiento con el número cuántico principal de la separación entre los niveles de energía debida al efecto Stark puede entenderse considerando que para mayor n el diámetro medio de la órbita de los electrones es mayor, y por lo tanto, la diferencia de energía potencial entre puntos diametralmente opuestos en esa órbita también es mayor.

* **XIV.8** Estudie el efecto Stark lineal y cuadrático en el átomo de hidrógeno con el método WKB (Wentzel, 1926).

Para facilitar la solución de este problema haremos uso del siguiente hecho: usualmente la solución a la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, y en general para cualquier campo central, se obtiene separando ésta en coordenadas esféricas; sin embargo, el problema del átomo de hidrógeno también es separable en coordenadas parabólicas. Esto último representa una gran ventaja, pues el problema sigue siendo separable cuando se aplica un campo eléctrico homogéneo en la dirección Oz.

Utilizaremos un sistema de coordenadas parabólicas que nos permitirá evitar un cambio de variable requerido al final de cálculos más usuales.[2] El sistema de coordenadas parabólicas ξ, η, φ lo definimos por las relaciones

$$x = \xi\eta\cos\varphi, \quad y = \xi\eta\,\mathrm{sen}\,\varphi, \quad z = \tfrac{1}{2}\left(\xi^2 - \eta^2\right), \tag{XIV.95}$$

donde φ representa al ángulo polar en el plano xy. Escribiendo

$$\rho^2 = x^2 + y^2, \quad r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \tag{XIV.96}$$

se obtiene

$$\rho^2 = \xi^2\eta^2, \quad \xi^2 = r + z, \quad \eta^2 = r - z, \quad r = \tfrac{1}{2}\left(\xi^2 + \eta^2\right). \tag{XIV.97}$$

Las superficies ξ =const y η =const son paraboloides de revolución. Las ecuaciones que describen las parábolas obtenidas al intersecar estos paraboloides de revolución con el plano yOz son

$$y^2 = -2\xi^2\left(z - \tfrac{1}{2}\xi^2\right); \quad y^2 = 2\eta^2\left(z + \tfrac{1}{2}\eta^2\right). \tag{XIV.98}$$

El foco de estas parábolas se encuentra en el origen. La curva $\eta = 0$ es el eje Oz-positivo (recorrido dos veces), mientras que $\xi = 0$ es el eje Oz-negativo. Conforme

[2]Las coordenadas parabólicas se definen de manera más usual mediante las expresiones

$$x = \sqrt{\xi\eta}\cos\varphi, \quad y = \sqrt{\xi\eta}\,\mathrm{sen}\,\varphi, \quad z = \tfrac{1}{2}\left(\xi - \eta\right).$$

Este sistema es utilizado en muchos los textos, como los de Ballentine, Bethe y Salpeter, Condon y Shortley, Landau y Lifshitz, etc.

el valor de ξ y η aumenta, las parábolas se vuelven cada vez más anchas y su vértice se va alejando del origen.

En términos de estas coordenadas el hamiltoniano del sistema,

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + e\mathcal{E}z, \tag{XIV.99}$$

se escribe en la forma

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m_0\left(\xi^2+\eta^2\right)}\left[p_\xi^2 + p_\eta^2 + \left(\frac{1}{\xi^2}+\frac{1}{\eta^2}\right)p_\varphi^2\right] \\ &\quad - \frac{2e^2}{\left(\xi^2+\eta^2\right)} + e\mathcal{E}\frac{\left(\xi^2-\eta^2\right)}{2}. \end{aligned} \tag{XIV.100}$$

Dado que la variable φ no aparece en esta expresión, p_φ corresponde a una constante de movimiento. Multiplicando la última ecuación por $2m_0\left(\xi^2+\eta^2\right)$ se obtiene (poniendo $H = E$)

$$p_\xi^2 + p_\eta^2 + \left(\frac{1}{\xi^2}+\frac{1}{\eta^2}\right)p_\varphi^2 - 4m_0e^2 + m_0e\mathcal{E}\left(\xi^4-\eta^4\right) - 2m_0\left(\xi^2+\eta^2\right)E = 0, \tag{XIV.101}$$

expresión que puede separarse en la pareja de igualdades

$$p_\xi^2 = 2m_0E\xi^2 + 2\alpha_1 - \frac{p_\varphi^2}{\xi^2} - m_0e\mathcal{E}\xi^4, \tag{XIV.102}$$

$$p_\eta^2 = 2m_0E\eta^2 + 2\alpha_2 - \frac{p_\varphi^2}{\eta^2} + m_0e\mathcal{E}\eta^4, \tag{XIV.103}$$

donde se ha puesto

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 2m_0e^2. \tag{XIV.104}$$

Para aplicar el método WKB escribimos las condiciones

$$\oint p_\xi d\xi = \pi\hbar\left(n_1+\tfrac{1}{2}\right), \quad \oint p_\eta d\eta = \pi\hbar\left(n_2+\tfrac{1}{2}\right), \quad \oint p_\varphi d\varphi = \pi\hbar\left(m+\tfrac{1}{2}\right), \tag{XIV.105}$$

con n_1, n_2 y m números enteros. Puesto que p_φ es una constante de movimiento, se obtiene inmediatamente que

$$p_\varphi = \frac{\hbar}{2}\left(m+\tfrac{1}{2}\right). \tag{XIV.106}$$

Para determinar el intervalo de integración de las otras dos variables observamos que p_ξ (o p_η) se obtiene como la raíz cuadrada de una función racional de ξ (o de η). Dado que el momento, y por ende sus componentes, son reales, los límites de integración de ξ y η están en los puntos para los cuales los valores de p_ξ^2 y p_η^2 cambian de signo, esto es, en los puntos donde p_ξ^2 y p_η^2 se anulan. Cuando $\mathcal{E}$ es cero, la expresión (XIV.102) arroja dos valores límites de ξ^2; tomando la raíz cuadrada de estos valores se obtienen cuatro valores límites para ξ. Sin embargo, como los valores negativos no tienen significado físico, debemos restringir nuestra atención a las raíces positivas. Cuando $\mathcal{E}$ es diferente de cero, la ecuación tiene una tercera raíz; sin embargo, ésta es muy grande y carece de interés cuando estamos tratando con valores de $\mathcal{E}$ obtenibles en el laboratorio. De esta manera, nos interesarán sólo

las dos raíces $\xi_{\text{máx}}$ y $\xi_{\text{mín}}$ que corresponden al par obtenido cuando $\mathcal{E} = 0$. De estas consideraciones sigue que la órbita de interés está restringida a un espacio anular acotado por las superficies $\xi = \xi_{\text{mín}}$, $\xi = \xi_{\text{máx}}$; $\eta = \eta_{\text{mín}}$, $\eta = \eta_{\text{máx}}$.

Con la sustitución $\xi^2 = x$ o $\eta^2 = x$ las integrales (XIV.105) se reducen a la forma

$$\pi\hbar\left(n + \tfrac{1}{2}\right) = \tfrac{1}{2}\oint\left(A + \frac{2B}{x} + \frac{C}{x^2} + Dx\right)^{1/2} dx, \tag{XIV.107}$$

con

$$A = 2m_0E, \quad B = \alpha_1, \quad C = -p_\varphi^2, \quad D = -me\mathcal{E} \tag{XIV.108}$$

para la variable ξ, y

$$A = 2m_0E, \quad B = \alpha_2, \quad C = -p_\varphi^2, \quad D = me\mathcal{E} \tag{XIV.109}$$

para la variable η. Efectuando la integración se obtiene

$$2\pi\hbar\left(n + \tfrac{1}{2}\right) = -2\pi i\left(\sqrt{C} - \frac{B}{\sqrt{A}}\right) + i\frac{\pi D}{2A^{3/2}}\left(\frac{3B^2}{A} - C\right). \tag{XIV.110}$$

Dado que el término que contiene D, y que da el efecto Stark, es muy pequeño comparado con los dos primeros, podemos despreciarlo sin cometer un error apreciable. Con esto se obtiene en primera aproximación para la razón B^2/A

$$\frac{B^2}{A} = \left(\sqrt{C} - i\frac{n'h}{\pi}\right)^2, \tag{XIV.111}$$

donde $n' = \frac{1}{2}(n + \frac{1}{2})$, con lo cual resulta a su vez que

$$\frac{3B^2}{A} - C = 2C - 6in'h\frac{\sqrt{C}}{\pi} - 3\left(\frac{n'h}{\pi}\right)^2. \tag{XIV.112}$$

Sustituyendo este valor en el último término de (XIV.110) queda una ecuación, de la cual es posible obtener B en términos de A, C, y D. Introduciendo los valores dados por (XIV.108) y (XIV.109) para B y D, y tomando en cuenta que $n' = n'_1 = \frac{1}{2}(n_1 + \frac{1}{2})$ ó $n'_2 = \frac{1}{2}(n_2 + \frac{1}{2})$, según se trate de ξ o de η, se obtiene un par de ecuaciones cuya suma conduce a la expresión

$$\begin{aligned} 2m_0e^2 &= \sqrt{A}\left[2\sqrt{C} - i\frac{(n'_1 + n'_2)\,h}{\pi}\right] \\ &\quad + \frac{m_0e\mathcal{E}}{2A}\left[\tfrac{3}{2}\frac{\left(n'^2_2 - n'^2_1\right)h^2}{\pi^2} + i\frac{3\,(n'_2 - n'_1)\,h\sqrt{C}}{\pi}\right]. \end{aligned} \tag{XIV.113}$$

Sustituyendo aquí el valor

$$\sqrt{C} = -i\frac{m'h}{2\pi} \tag{XIV.114}$$

obtenemos como valor aproximado de A, despreciando los términos en $\mathcal{E}$,

$$A = -\frac{4\pi^2m_0^2e^4}{h^2\left(n'_1 + n'_2 + m'\right)^2}. \tag{XIV.115}$$

Introducimos ahora este valor en el término de corrección que aparece en la ecuación (XIV.110). Escribiendo $n_1' + n_2' + m' = n$, el número cuántico total, calculamos un valor corregido para A, que utilizamos en combinación con (XIV.107), para llegar finalmente a

$$E = -\frac{m_0 e^4}{2n^2\hbar^2} + \frac{3\hbar^2\mathcal{E}}{4m_0 e} n\,(n_1 - n_2)\,. \tag{XIV.116}$$

Como los estados con el mismo valor absoluto de m tienen la misma energía, hemos restringido m a valores positivos en esta expresión. Un procedimiento iterativo laborioso permite obtener las correcciones cuadráticas.[3]

XIV.9 Obtenga la ecuación diferencial (T14.100) a partir de la expresión (T14.96).

En el estudio del efecto Stark cuadrático del estado base del átomo de hidrógeno resulta conveniente construir un operador $\hat{F}(\mathbf{x})$, que sólo depende de las coordenadas y que satisface la ecuación (T14.96)

$$\left\langle k \mid \left[\hat{F}, \hat{H}_0\right] \mid 0 \right\rangle = \langle k \mid z \mid 0 \rangle\,, \tag{XIV.117}$$

donde

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\,(\mathbf{x}, t) \tag{XIV.118}$$

es el hamiltoniano del sistema no perturbado. Por generalidad se considera un hamiltoniano no necesariamente central y con una posible dependencia temporal. Los kets $|0\rangle$ y $|k\rangle$ representan el estado base y un estado excitado del sistema, respectivamente. Como $\hat{F}$ conmuta con $V\,(\mathbf{x},t)$, pero no con el operador de energía cinética, se tiene de (XIV.117) que

$$\begin{aligned}\left[\hat{F}, \hat{H}_0\right]|0\rangle &= \left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2, \hat{F}\right]|0\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\left(\hat{F}\,|0\rangle\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\hat{F}\nabla^2\,|0\rangle = z\,|0\rangle\,. \end{aligned}\tag{XIV.119}$$

Como por hipótesis $\hat{F}$ depende sólo de la posición, podemos intentar simplificar esta ecuación considerándolo como un operador escalar, lo que permite escribir

$$\nabla^2\left(\hat{F}\,|0\rangle\right) \to \nabla^2\left(\hat{F}\Psi_{100}\right) = \Psi_{100}\nabla^2\hat{F} + 2\nabla\hat{F}\cdot\nabla\Psi_{100} + \hat{F}\nabla^2\Psi_{100}, \tag{XIV.120}$$

con lo que la ecuación anterior se transforma en

$$z\Psi_{100} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\nabla^2\hat{F}\right) + 2\nabla\hat{F}\cdot\nabla\right]\Psi_{100}. \tag{XIV.121}$$

Por lo tanto,

$$\nabla^2\hat{F} + 2\frac{\nabla\Psi_{100}}{\Psi_{100}}.\nabla\hat{F} = \frac{2m}{\hbar^2}z. \tag{XIV.122}$$

Como la función de onda del estado base del átomo de hidrógeno

$$\Psi_{100} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}e^{-Zr/a_0} \tag{XIV.123}$$

[3] La corrección a la energía proporcional a $\mathcal{E}^2$ fue calculada por Epstein en *Ann. Physik* **50** (1916) 489.

sólo depende de r, tomando su gradiente se obtiene

$$\nabla\Psi_{100} = \hat{\mathbf{r}}\left(-\frac{Z}{a_0}\right)\Psi_{100} \quad \Rightarrow \frac{\nabla\Psi_{100}}{\Psi_{100}}\cdot\nabla\hat{F} = \left(-\frac{Z}{a_0}\right)\frac{\partial\hat{F}}{\partial r},$$

y la ecuación (XIV.122) se reduce a

$$\nabla^2\hat{F} - \frac{2Z}{a_0}\frac{\partial\hat{F}}{\partial r} = \frac{2m}{\hbar^2}r\cos\theta, \tag{XIV.124}$$

que corresponde precisamente a la ecuación (T14.100).

XIV.10 Resuelva detalladamente la ecuación diferencial (XIV.124), que corresponde a la (T14.100) del texto.

El laplaciano de $\hat{F}$ en coordenadas esféricas es

$$\nabla^2\hat{F} = \frac{1}{r^2\operatorname{sen}\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial\hat{F}}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial\theta}\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\hat{F}}{\partial\theta} + \frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial^2\hat{F}}{\partial\varphi^2}\right), \tag{XIV.125}$$

por lo que si se supone que $\hat{F}$ tiene la forma

$$\hat{F} = f(r)\cos\theta, \tag{XIV.126}$$

$\nabla^2\hat{F}$ se reduce a

$$\nabla^2\hat{F} = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial f}{\partial r} - \frac{2}{r^2}f\right)\cos\theta. \tag{XIV.127}$$

Es ahora claro que la expresión (XIV.126) permite separar variables en la ecuación (XIV.124). Sustituyendo y simplificando se obtiene así una ecuación diferencial para $f(r)$:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + 2\left(\frac{1}{r} - \frac{Z}{a_0}\right)\frac{\partial f}{\partial r} - \frac{2}{r^2}f = \frac{2m}{\hbar^2}r. \tag{XIV.128}$$

Para resolver esta ecuación basta proponer que $f(r)$ se puede representar con un desarrollo en serie de potencias,

$$f(r) = \sum_{n=0}^{\infty}\alpha_n r^n, \tag{XIV.129}$$

pues sustituyendo en (XIV.128) se obtiene

$$\sum_{n=0}^{\infty} n(n-1)\alpha_n r^{n-2} + \sum_{n=0}^{\infty} 2n\alpha_n r^{n-2} - \sum_{n=0}^{\infty}\frac{2Z}{a_0}n\alpha_n r^{n-1} - \sum_{n=0}^{\infty} 2\alpha_n r^{n-2} = \frac{2m}{\hbar^2}r. \tag{XIV.130}$$

Redefiniendo los índices podemos escribir esto en la forma:

$$\sum_{n=-2}^{\infty}(n+1)(n+4)\alpha_{n+2}r^n - \sum_{n=-1}^{\infty}\frac{2Z}{a_0}(n+1)\alpha_{n+1}r^n = \frac{2m}{\hbar^2}r. \tag{XIV.131}$$

Dado que las potencias de r constituyen una base completa, para que esta expresión pueda cumplirse deberán satisfacerse las siguientes condiciones:

a) De $n = -2$,

$$\alpha_0 = 0. \tag{XIV.132}$$

b) De $n = -1$, el coeficiente de α_1 se anula, por lo que α_1 es una constante arbitraria a determinar.

c) De $n = 0$,

$$4\alpha_2 - \frac{2Z}{a_0}\alpha_1 = 0,$$
$$\alpha_2 = \frac{Z}{2a_0}\alpha_1. \tag{XIV.133}$$

Dado que en el lado derecho de la ecuación a resolver aparece r como máxima potencia, puede obtenerse una solución particular tomando $\alpha_n = 0$ para $n \geq 3$. Con esta selección se obtiene

$$f(r) = \alpha_1 r + \frac{Z}{2a_0}\alpha_1 r^2 = \alpha_1 r\left(1 + \frac{Z}{2a_0}r\right). \tag{XIV.134}$$

El valor de α_1 se obtiene al sustituir esta expresión en la ecuación diferencial original, lo que da $\alpha_1 = -ma_0^2/Z^2$, es decir,

$$f(r) = -\frac{ma_0}{2Z\hbar^2}\left(r + \frac{2a_0}{Z}\right)r. \tag{XIV.135}$$

De aquí que una solución de la ecuación diferencial (XIV.124) sea

$$\hat{F} = -\frac{ma_0}{2Z\hbar^2}\left(r + \frac{2a_0}{Z}\right)z. \tag{XIV.136}$$

Como se muestra en el texto, no es necesario construir la solución general para los propósitos del cálculo.

XIV.11 Calcule el efecto Stark en el átomo de hidrógeno para los niveles con $n = 3$. Haga el máximo uso posible de las simetrías del sistema, pero use coordenadas esféricas.

El átomo de hidrógeno posee 9 estados degenerados con $n = 3$; ellos corresponden a $(l, m) = (0, 0)$, $(1, -1)$, $(1, 0)$, $(1, 1)$, $(2, -2)$, $(2, -1)$, $(2, 0)$, $(2, 1)$, $(2, 2)$, los que etiquetaremos del 1 al 9 en este orden; por lo tanto, el determinante secular es de dimensión 9×9. A su vez, los elementos de matriz del potencial de perturbación,

$$\hat{V} = -e\mathcal{E}z = -e\mathcal{E}r\cos\theta, \tag{XIV.137}$$

están dados por

$$\left\langle nlm \mid \hat{V} \mid nl'm' \right\rangle = -e\mathcal{E}\int R_{nl}^{*}(r)\, R_{nl'}(r)\, r^3 dr \int Y_l^{m*}(\theta,\varphi)\cos\theta Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)d\Omega. \tag{XIV.138}$$

Es posible saber cuáles de estos elementos de matriz se anulan tomando en cuenta que la paridad de $Y_l^m(\theta,\varphi)$ es $(-1)^l$, que $\cos\theta$ es impar frente a una reflexión de coordenadas y que se cumplen la relación de recurrencia, ecuación (XIII.72),

$$\cos\theta Y_{l'}^{m'} = \sqrt{\frac{(l'+m'+1)\,(l'-m'+1)}{(2l'+1)\,(2l'+3)}}Y_{l'+1}^{m'} + \sqrt{\frac{(l'+m')\,(l'-m')}{(2l'-1)\,(2l'+1)}}Y_{l'-1}^{m'}, \tag{XIV.139}$$

y la condición de ortogonalidad de los armónicos esféricos,

$$\int Y_l^{m*}(\theta,\varphi)Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)d\Omega = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'}. \tag{XIV.140}$$

De estas consideraciones sigue que sólo los elementos de matriz que corresponden a la forma $\left\langle n,l,m \mid \hat{V} \mid n,l\pm 1,m\right\rangle$ pueden ser diferentes de cero. Estos elementos se determinan con facilidad calculando primero la integral angular, lo que da

$$\begin{aligned}\left\langle nlm \mid \hat{V} \mid nl'm'\right\rangle &= -e\mathcal{E}\int R_{nl}^*(r)R_{nl'}(r)r^3dr \\ &\quad\times\left[\sqrt{\frac{(l'+m'+1)\,(l'-m'+1)}{(2l'+1)\,(2l'+3)}}\delta_{l,l'+1}\right. \\ &\quad\left.+\ \sqrt{\frac{(l'+m')\,(l'-m')}{(2l'-1)\,(2l'+1)}}\delta_{l,l'-1}\right]\delta_{m,m'}.\end{aligned} \tag{XIV.141}$$

Los únicos elementos de matriz diferentes de cero resultan

$$\left\langle 300 \mid \hat{V} \mid 310\right\rangle = \left\langle 310 \mid \hat{V} \mid 300\right\rangle \equiv A, \tag{XIV.142}$$

$$\left\langle 3\,1-1 \mid \hat{V} \mid 3\,2-1\right\rangle = \left\langle 3\,2-1 \mid \hat{V} \mid 3\,1-1\right\rangle \equiv B, \tag{XIV.143}$$

$$\left\langle 310 \mid \hat{V} \mid 320\right\rangle = \left\langle 320 \mid \hat{V} \mid 310\right\rangle \equiv C, \tag{XIV.144}$$

$$\left\langle 311 \mid \hat{V} \mid 321\right\rangle = \left\langle 321 \mid \hat{V} \mid 311\right\rangle \equiv D. \tag{XIV.145}$$

Como el resultado en (XIV.141) es invariante frente a la sustitución $m' \leftrightarrow -m'$, se cumple además que

$$D = B. \tag{XIV.146}$$

Con ayuda de (XIV.141) y usando las funciones radiales dadas por las ecuaciones (XIV.244) o (T13.53)) se obtiene para el coeficiente A:

$$\begin{aligned}A &= -\frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{3}}\int R_{30}^*(r)\,R_{31}(r)\,r^3\,dr \\ &= -\frac{8\sqrt{2}e\mathcal{E}}{3\sqrt{3}}\left(\frac{1}{3a_0}\right)^4\int_0^\infty\left(1-\frac{2r}{3a_0}+\frac{2r^2}{27a_0^2}\right)\left(1-\frac{r}{6a_0}\right)r^4e^{-2r/3a_0}\,dr.\end{aligned} \tag{XIV.147}$$

Con el cambio de variable $x = 2r/3a_0$ y utilizando la fórmula

$$\int_0^\infty e^{-x}x^n = n! \tag{XIV.148}$$

se llega a

$$A = -\tfrac{1}{2\sqrt{6}} e\mathcal{E}a_0 \int_0^\infty \left(x^4 - \tfrac{5}{4}x^5 + \tfrac{5}{12}x^6 - \tfrac{1}{24}x^7\right) e^{-x} dx = 6\sqrt{\tfrac{3}{2}} V_0, \qquad \text{(XIV.149)}$$

en donde se puso $V_0 = e\mathcal{E}a_0$. De manera análoga se obtiene

$$\begin{aligned} B &= D = -\frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{5}} \int R_{31}^*(r)\, R_{32}(r)\, r^3\, dr \\ &= -\frac{16}{45} e\mathcal{E} \left(\frac{1}{3a_0}\right)^6 \int_0^\infty r^6 \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right) e^{-2r/3a_0}\, dr \\ &= -\frac{e\mathcal{E}a_0}{120} \int_0^\infty \left(x^6 - \tfrac{1}{4}x^7\right) e^{-x}\, dx = \tfrac{9}{2} V_0. \qquad \text{(XIV.150)} \\ C &= -\frac{2e\mathcal{E}}{\sqrt{15}} \int R_{31}^*(r)\, R_{32}(r)\, r^3 dr = \tfrac{2}{\sqrt{3}} B = 3\sqrt{3} V_0. \qquad \text{(XIV.151)} \end{aligned}$$

La ecuación secular (T14.45) toma la forma, con $\delta E \equiv \delta E_3^{(1)}$,

$$\begin{vmatrix} -\delta E & 0 & A & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\delta E & 0 & 0 & 0 & B & 0 & 0 & 0 \\ A & 0 & -\delta E & 0 & 0 & 0 & C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\delta E & 0 & 0 & 0 & D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\delta E & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 & 0 & -\delta E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C & 0 & 0 & 0 & -\delta E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D & 0 & 0 & 0 & -\delta E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\delta E \end{vmatrix} = 0. \qquad \text{(XIV.152)}$$

Desarrollando se obtiene

$$\left(\delta E_3^{(1)}\right)^3 \left[\left(\delta E_3^{(1)}\right)^2 - D^2\right] \left[\left(\delta E_3^{(1)}\right)^2 - B^2\right] \left[\left(\delta E_3^{(1)}\right)^2 - \left(A^2 + C^2\right)\right] = 0.$$

De aquí sigue que las correcciones a primer orden a la energía de los nueve estados degenerados que corresponden al nivel $n = 3$ debidas al campo eléctrico son: 0 para tres estados, $\pm B = \pm\frac{9}{2}V_0$ para dos estados, $\pm D = \pm\frac{9}{2}V_0$ para otros dos estados y $\pm\sqrt{A^2 + C^2} = \pm 9V_0$ para los dos estados restantes. En total, el nivel se desdobla en cinco componentes, simétricamente colocadas alrededor de la energía original y separadas $\pm\frac{9}{2}V_0$. La degeneración inicial persiste a este orden para tres estados, cuya energía no cambia; también continúan siendo degeneradas las dos parejas de estados cuyas correcciones coinciden debido a la igualdad de B y D, consecuencia esta última de la simetría respecto a la inversión del eje Oz. En el siguiente problema y el ejercicio XIV.32 se completa el análisis de este problema.

Como se aprecia fácilmente con este ejemplo, el método usado, además de ser excesivamente engorroso, no permite obtener con facilidad conclusiones sistemáticas. Es preferible utilizar otros procedimientos, como el empleo de un sistema de coordenadas parabólicas en que el problema perturbado tiene solución exacta, etc.[4] Como se señala en el texto, tales procedimientos más poderosos arrojan para las correcciones a primer orden:

$$E_n^{(1)} = \tfrac{3}{2} knV_0, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm(n-1). \qquad \text{(XIV.153)}$$

[4]El tratamiento del efecto Stark en coordenadas parabólicas puede verse en H. A. Bethe y E. E. Salpeter, *Handbuch der Physik*, volumen XXXV, Atoms I: *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Systems*, (Springer, 1957)

Es claro que los resultados anteriores son casos particulares de esta ley.

XIV.12 Calcule las intensidades de las componentes de la línea H_α del hidrógeno, desdoblada por efecto Stark lineal.

La línea H_α se genera con la transición $n = 3 \to n = 2$; en el problema anterior vimos que, debido al efecto Stark lineal, el nivel $n = 3$ se descompone en cinco niveles (a primer orden en el campo eléctrico externo); como el nivel $n = 2$ a su vez se desdobla en tres componentes (como se discute en la subsección 14.5.2 del texto y sigue de la ecuación (XIV.153)), la línea H_α se descompone en 15 líneas muy cercanas, como se precisa a continuación. El campo externo descompone el nivel $n = 2$ a primer orden en los siguientes tres niveles de energía ($a_0 = \hbar^2/m_0e^2$), como sigue de (XIV.153):

$$E_2 = E_2^{(0)} + \begin{cases} 3V_0 \\ 0 \\ -3V_0 \end{cases}, \quad V_0 = e\mathcal{E}a_0, \quad E_2^{(0)} = -\frac{me^4}{8\hbar^2}. \tag{XIV.154}$$

A su vez, para $n = 3$, la degeneración (de grado 9) se rompe parcialmente para dar lugar a los cinco niveles de energía (como también sigue de (XIV.153)):

$$E_3 = E_3^{(0)} + \begin{cases} 9V_0 \\ \frac{9}{2}V_0 \\ 0 \\ -\frac{9}{2}V_0 \\ -9V_0 \end{cases}, \quad E_3^{(0)} = -\frac{me^4}{18\hbar^2}. \tag{XIV.155}$$

Con la notación[5]

$$\omega_0 = \left(E_3^{(0)} - E_2^{(0)}\right)/\hbar = 5/72 \text{ ua}, \quad \omega' = V_0/\hbar = \mathcal{E} \text{ ua}, \tag{XIV.156}$$

con 1 ua$= m_0e^4/\hbar^3$, las 15 componentes generadas por estos desdoblamientos resultan (véase la figura XIV.1, correspondiente a la figura 14.2 del texto) ω_0, $\omega_0 \pm {}^3\!/_2\,\omega'$, $\omega_0 \pm 3\,\omega'$, $\omega_0 \pm {}^9\!/_2\,\omega'$, $\omega_0 \pm 6\,\omega'$, $\omega_0 \pm {}^{15}\!/_2\,\omega'$, $\omega_0 + 9\,\omega'$, $\omega_0 + 12\,\omega'$.

Para calcular las intensidades de las nuevas líneas requerimos las funciones de onda corregidas a primer orden; su determinación se simplifica de manera importante trabajando con un sistema de coordenadas parabólicas, pues, como ha sido ya señalado, el problema del efecto Stark en estas coordenadas es separable y el cálculo de las expresiones para las funciones de onda que corresponden a $n = 2$ y $n = 3$ es relativamente sencillo.

En términos de las coordenadas parabólicas ξ, η, φ, definidas por las relaciones (obsérvese que éstas no son las coordenadas usadas en el problema XIV.8, sino las coordenadas parabólicas usuales)

$$x = \sqrt{\xi\eta}\cos\varphi, \quad y = \sqrt{\xi\eta}\,\mathrm{sen}\,\varphi, \quad z = \tfrac{1}{2}(\xi - \eta), \tag{XIV.157}$$

y en unidades atómicas ($m_0 = \hbar = e = 1$), las funciones propias del átomo de hidrógeno en presencia de efecto Stark son[6]

$$\psi = u_1(\xi)\,u_2(\eta)\,e^{im\varphi}, \tag{XIV.158}$$

[5]La unidad de intensidad del campo eléctrico en unidades atómicas es el campo producido por un protón a la distancia $a_0 = \hbar^2/m_0e^2$ (radio de Bohr), que es igual a 5.142×10^9 V/cm.

[6]Véase el libro de Bethe y Salpeter mencionado arriba, p. 315.

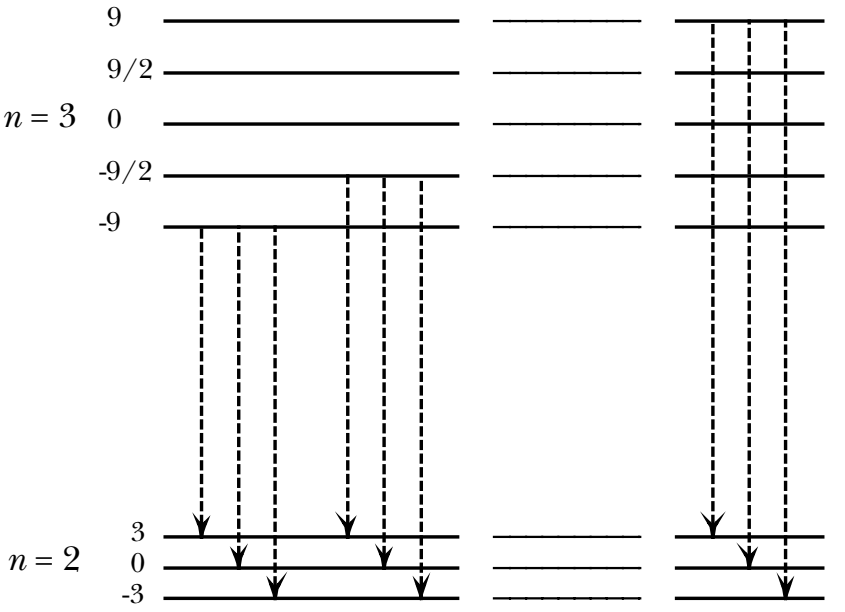


FIGURA XIV.1 *Efecto Stark lineal para la línea H alfa, debido al desdoblamiento de los niveles* $n = 2$ *y* $n = 3$.

donde

$$u_1(\xi) = \frac{\sqrt{n_1!}}{[(n_1+m)!]^{3/2}} e^{-\varepsilon\xi/2} \xi^{m/2} \varepsilon^{(m+1)/2} L^m_{n_1+m}(\varepsilon\xi) \tag{XIV.159}$$

y una expresión análoga para $u_2(\eta)$; además,

$$\varepsilon = \sqrt{-2E}, \quad n_1, n_2, m = 1, 2, 3, \ldots \tag{XIV.160}$$

La energía a primer orden en $\mathcal{E}$ es (cf. ecuación (XIV.116))

$$E = -\frac{Z^2}{2n^2} + \frac{3\mathcal{E}}{2Z} n(n_1 - n_2), \quad n = n_1 + n_2 + m. \tag{XIV.161}$$

Para el cálculo de los coeficientes A de Einstein que determinan las probabilidades de emisión espontánea, y de ahí las intensidades de las líneas, requerimos conocer las reglas de selección que se aplican en el presente caso. En presencia de un campo eléctrico hay sólo una regla de selección, la que se aplica al número cuántico magnético m, que en este caso determina la componente del momento angular orbital respecto a la dirección del campo eléctrico. Esta regla establece que las transiciones permitidas corresponden a:

a) $\Delta m = 0$ para radiación polarizada en la dirección paralela al campo;

b) $\Delta m = \pm 1$ para radiación polarizada en una dirección perpendicular al campo.

No existe ninguna regla de selección respecto a los números cuánticos parabólicos n_1 y n_2. Sin embargo, existe una cuasi-regla de selección, que establece que las componentes más alejadas, que uno esperaría ver aparecer en el patrón de líneas, tienen generalmente intensidades no observables. Esto sucede, por ejemplo, para

la componente $\pi 8$ de la línea H_α, que se encuentra desplazada $8\mathcal{E}/15620$ cm^{-1} respecto a la línea no perturbada y corresponde a la transición del estado $n = 3$, $n_1 = 2$, $n_2 = m = 0$ al estado $n = 2$, $n_1 = 0$, $n_2 = 1$, $m = 0$.

Las intensidades de las componentes Stark de la serie de Balmer fueron calculadas por primera vez por Schrödinger en 1926, y desde entonces se han comparado detalladamente las predicciones con los datos experimentales. Para determinar estas intensidades ampliamos los lineamientos expuestos en la sección 9.7 del texto, como sigue: Consideramos que, en general, pueden darse diversas situaciones. Una simple sucede cuando se mantiene a los electrones distribuidos con igual probabilidad entre los estados que corresponden a un nivel degenerado (del sistema no perturbado); en este caso, la intensidad de la línea debida a la transición $nl \to n'l'$ es

$$J_{nl}^{n'l'} = (2l+1)\,\hbar\omega_{nn'}A_{nn'}. \tag{XIV.162}$$

Esta expresión es llamada *intensidad estadística*. Por otro lado, en condiciones naturales la intensidad de la radiación emitida por una transición dada se obtiene multiplicando la intensidad estadística anterior por la vida media del estado en que se origina dicha transición. Esta última es $\tau_{nl} = (\sum_{n'} A_{nn'})^{-1}$ (como se discute en la sección 9.7 del texto), y la intensidad emitida queda entonces dada por

$$\left[J_{nl}^{n'l'}\right] = J_{nl}^{n'l'}\tau_{nl} = (2l+1)\,\hbar\omega_{nn'}\frac{A_{nn'}}{\sum_{n'}A_{nn'}}. \tag{XIV.163}$$

Esta es la llamada *intensidad dinámica*. Al final del problema se amplía un tanto este tema.

La determinación de los coeficientes de Einstein $A_{nn'}$ requiere de los elementos de matriz de las coordenadas x y z. Éstos han sido obtenidos por Gordon para un sistema de coordenadas parabólicas[7] y están dados por las siguientes expresiones:

a) Para radiación polarizada paralela al campo,

$$\begin{aligned} z_{n_1n_2m}^{n_1'n_2'm} &= (-1)^{n_1'+n_2'}\,\frac{a_0}{4\,(m!)^2}\sqrt{\frac{(n_1+m)!\,(n_2+m)!\,(n_1'+m)!\,(n_2'+m)!}{n_1!n_2!n_1'!n_2'!}} \\ &\times\left(\frac{4nn'}{(n-n')^2}\right)^{m+2}\left(\frac{n-n'}{n+n'}\right)^{n+n'}\left\{\left[2\left(n_1'-n_2'\right)\frac{n^2+n'^2}{(n+n')^2}\right.\right. \\ &-\left.\left.(n_1-n_2)\,\frac{4nn'}{(n+n')^2}\right]\Psi_m\left(n_1n_1'\right)\Psi_m\left(n_2n_2'\right)\right. \\ &-2\Big[n_1'\Psi_m\left(n_1,n_1'-1\right)\Psi_m\left(n_2n_2'\right) \\ &\left.-\,n_2'\Psi_m\left(n_1,n_1'\right)\Psi_m\left(n_2,n_2'-1\right)\Big]\right\}. \end{aligned} \tag{XIV.164}$$

[7] W. Gordon, *Ann. d. Phys.* **2** (1929) 1031.

b) Para radiación con polarización perpendicular al campo,

$$
\begin{aligned}
x_{n_1 n_2 m}^{n_1' n_2' m-1} &= \frac{(-1)^{n_1'+n_2'}\, a_0}{4\left[(m-1)!\right]^2} \\
&\times \sqrt{\frac{(n_1+m)!\,(n_2+m)!\,(n_1'+m-1)!\,(n_2'+m-1)!}{n_1!n_2!n_1'!n_2'!}} \\
&\times \left(\frac{4nn'}{(n-n')^2}\right)^{m+1} \left(\frac{n-n'}{n+n'}\right)^{n+n'} \\
&\times \left\{ \Psi_{m-1}\left(n_1 n_1'\right) \Psi_{m-1}\left(n_2 n_2'\right) - \left(\frac{n-n'}{n+n'}\right)^2 \right. \\
&\left. \times \Psi_{m-1}\left(n_1+1, n_1'\right) \Psi_{m-1}\left(n_2+1, n_2'\right) \right\}. \qquad \text{(XIV.165)}
\end{aligned}
$$

En estas expresiones Ψ_m es la función hipergeométrica confluente

$$
\Psi_m\left(n_i, n_i'\right) = F\left(-n_i, -n_i', m+1, -\frac{4nn'}{(n-n')^2}\right). \qquad \text{(XIV.166)}
$$

A continuación tabulamos las probabilidades de las transiciones que se originan en los niveles (con efecto Stark) con $n = 3$. En ellas[8] la terna $n_1 n_2 m$ denota los número cuánticos del estado inicial, A_{rel} es la probabilidad de transición en unidades arbitrarias, A_{abs} está en unidades de 10^8 s^{-1} y τ es la vida media $\times 10^{-8}$s.

a) Para polarización π:

$n_1 n_2 m$	Estado Final	A_{rel}
002	–	0
110	100	729
110	101	729
101	001	1152
200	100	1681
200	010	1

b) Para polarización σ:

$n_1 n_2 m$	Estado Final	A_{rel}
002	001	2304
110	001	882
101	100	968
101	010	8
200	010	18

c) Para $\sigma + 2\pi$:

$n_1 n_2 m$	A_{rel}	A_{abs}	τ
002	4608	0.64	1.56
110	3222	0.45	2.22
101	3104	0.43	0.80
200	1718	0.24	0.94

[8]Estas tablas se encuentran en el trabajo de Schrödinger y en el de Bethe y Salpeter mencionados arriba.

Las intensidades de las componentes del efecto Stark para las líneas H_α resultan como sigue.

a) Con polarización paralela al campo eléctrico:

Estado inicial	Peso estadístico	Estado final	$\Delta\nu$	J_{S_T}	J_{D_T}	J_{S_E}	J_{D_E}
110	1	010	2	32	89	31	79
101	2	001	3	100	100	100	100
200	1	100	4	73	86	76	92
200	1	010	8	0	0	0	0

b) Con polarización perpendicular al campo:

Estado inicial	Peso estadístico	Estado final	$\Delta\nu$	J_{S_T}	J_{D_T}	J_{S_E}	J_{D_E}
002	2	001	0	100	100	100	100
110	1	001	0	100	100	100	100
101	2	100	1	35	17	38	38
101	2	010	5	0	0	0	0
200	1	001	6	0	0	0	0

$\Delta\nu$ denota el desplazamiento de la línea respecto a su posición en ausencia de campo, en unidades de $\mathcal{E}/15620$ cm^{-1}; J_S y J_D expresan las intensidades estadística y dinámica, respectivamente, en unidades tales que la componente más intensa tiene un valor de 100. Los subíndices T y E denotan los resultados teóricos y los experimentales, respectivamente. Las primeras tablas permiten determinar la vida media con efecto Stark de los términos con número cuántico principal $n = 3$. Las dos últimas tablas son utilizadas en el cálculo de las intensidades de las componentes H_α; para este propósito se acostumbra considerar alguna de las dos siguientes situaciones:

a) La *ocupación* de cada nivel es proporcional a su peso estadístico (es decir, en promedio cada nivel está ocupado por el mismo número de átomos).

b) La *producción* de cada nivel es proporcional a su peso estadístico (es decir, llega a cada nivel el mismo número de átomos por unidad de tiempo).

Bajo la primera de estas suposiciones, las intensidades de emisión son las estadísticas, y se calculan multiplicando las probabilidades de transición de las tablas por el peso estadístico del estado inicial. Los resultados corresponden, en este caso, a los de Schrödinger.

Los resultados experimentales tabulados arriba son los de Mark y Wierl, y fueron obtenidos empleando dos procedimientos diferentes. En el primero, una mezcla de hidrógeno y nitrógeno se mantuvo a una presión (relativamente) alta (0.02 a 0.03 mm Hg) para aumentar la probabilidad de excitación continua de los átomos de hidrógeno por colisión. En el segundo caso, la emisión se realizó esencialmente en el vacío (10^{-14} mm Hg), de tal manera que se debió sólo a átomos que entraban ya excitados a la región bajo observación. Los datos obtenidos con el primer tipo de experimento concuerdan satisfactoriamente con

las intensidades estadísticas de Schrödinger, mientras que los obtenidos con el segundo método concuerdan satisfactoriamente con las intensidades dinámicas. Esto es de esperarse, pues en los experimentos llevados a cabo bajo presión las continuas colisiones aseguraban una distribución uniforme de los átomos entre los diferentes niveles Stark, mientras que en los experimentos en el vacío no sería correcto suponer una distribución uniforme entre niveles.

XIV.13 Calcule las correcciones a la energía de los niveles $n = 2$ debidas al efecto Stark en átomos de hidrógeno, a segundo orden de la teoría de perturbaciones.

El primer estado excitado del átomo de hidrógeno, $n = 2$, posee degeneración de cuarto grado, pues a él corresponden los estados $|200\rangle, |21-1\rangle, |210\rangle$ y $|211\rangle$, todos con la misma energía $E_2^{(0)} = -e^2/8a_0$; las correcciones a primer orden están dadas por (XIV.154), y son $0, \pm 3V_0$. Las correcciones a la energía a segundo orden pueden encontrarse resolviendo el sistema de ecuaciones

$$\left[\sum_l{}' \sum_i \frac{V_{sl}V_{li}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} - \delta E_n^{(2)}\delta_{si}\right] A_{si} = 0, \tag{XIV.167}$$

donde s e i denotan estados degenerados correspondientes al nivel n y la prima sobre la suma indica restringirla a los estados l distintos de los degenerados. Denotando a los estados degenerados correspondientes a $n = 2$ como

$$|a\rangle = |200\rangle, \quad |b\rangle = |21-1\rangle, \quad |c\rangle = |210\rangle, \quad |d\rangle = |211\rangle, \tag{XIV.168}$$

la ecuación secular obtenida de (XIV.167) es

$$\begin{vmatrix} \sum' \frac{|V_{al}|^2}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} - \delta & \sum' \frac{V_{al}V_{lb}}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum' \frac{V_{al}V_{lc}}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum' \frac{V_{al}V_{ld}}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} \\ \sum' \frac{V_{bl}V_{la}}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum' \frac{|V_{bl}|^2}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} - \delta & \sum' \frac{V_{bl}V_{lc}}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum' \frac{V_{bl}V_{ld}}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} \\ \sum' \frac{V_{cl}V_{la}}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum' \frac{V_{cl}V_{lb}}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum' \frac{|V_{cl}|^2}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} - \delta & \sum' \frac{V_{cl}V_{ld}}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} \\ \sum' \frac{V_{dl}V_{la}}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum' \frac{V_{dl}V_{lb}}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum' \frac{V_{dl}V_{lc}}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum' \frac{|V_{dl}|^2}{E_2^{(0)}-E_l^{(0)}} - \delta \end{vmatrix} = 0, \tag{XIV.169}$$

donde $\delta = \delta E_2^{(2)}$. Los elementos de matriz del hamiltoniano de perturbación están dados en general por la ecuación (XIV.141). Para $n = 2$ los únicos elementos con $n' \neq n$ distintos de cero son:

$$\left\langle 200 \mid \hat{V} \mid n'10 \right\rangle = -\tfrac{1}{\sqrt{3}} e\mathcal{E} \int_0^\infty R_{20}(r)\, R_{n'1}(r)\; r^3\, dr, \tag{XIV.170}$$

$$\left\langle 21-1 \mid \hat{V} \mid n'2-1 \right\rangle = \left\langle 211 \mid \hat{V} \mid n'21 \right\rangle = -\tfrac{1}{\sqrt{5}} e\mathcal{E} \int_0^\infty R_{21}(r)\, R_{n'2}(r)\; r^3\, dr, \tag{XIV.171}$$

$$\left\langle 210 \mid \hat{V} \mid n'00 \right\rangle = -\tfrac{1}{\sqrt{3}} e\mathcal{E} \int_0^\infty R_{21}(r)\, R_{n'0}(r)\; r^3\, dr, \tag{XIV.172}$$

$$\left\langle 210 \mid \hat{V} \mid n'20 \right\rangle = -\tfrac{2}{\sqrt{15}} e\mathcal{E} \int_0^\infty R_{21}(r)\, R_{n'2}(r)\; r^3\, dr. \tag{XIV.173}$$

De aquí sigue que el determinante secular sólo tiene elementos distintos de cero en la diagonal principal, por lo que resulta para las correcciones a la energía a

segundo orden

$$\delta E_{2a}^{(2)} = \sum{}' \frac{|V_{al}|^2}{E_2^{(0)} - E_l^{(0)}} = \frac{8a_0}{e^2} \sum_{n\neq 2} \frac{n^2}{4-n^2} \left|\left\langle 200 \mid \hat{V} \mid n10 \right\rangle\right|^2, \quad \text{(XIV.174)}$$

$$\delta E_{2b}^{(2)} = \sum{}' \frac{|V_{bl}|^2}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

$$= \frac{8a_0}{e^2} \sum_{n\neq 2} \frac{n^2}{4-n^2} \left|\left\langle 21-1 \mid \hat{V} \mid n'2-1 \right\rangle\right|^2, \quad \text{(XIV.175)}$$

$$\delta E_{nc}^{(2)} = \sum{}' \frac{|V_{cl}|^2}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

$$= \frac{8a_0}{e^2} \sum_{n\neq 2} \frac{n^2}{4-n^2} \left(\left|\left\langle 210 \mid \hat{V} \mid n'00 \right\rangle\right|^2 + \left|\left\langle 210 \mid \hat{V} \mid n'20 \right\rangle\right|^2 \right), \quad \text{(XIV.176)}$$

$$\delta E_{nd}^{(2)} = \sum{}' \frac{|V_{dl}|^2}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} = \frac{8a_0}{e^2} \sum_{n\neq 2} \frac{n^2}{4-n^2} \left|\left\langle 211 \mid \hat{V} \mid n'21 \right\rangle\right|^2. \quad \text{(XIV.177)}$$

Para evaluar los elementos de matriz requeridos partimos de la expresión (XIII.83)

$$R_{nl}(r) = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{a_0^3 (n+l)!}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-r/na_0} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right), \quad \text{(XIV.178)}$$

de la que sigue

$$R_{20}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2a_0^3}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}, \quad \text{(XIV.179)}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}, \quad \text{(XIV.180)}$$

$$R_{n0}(r) = \frac{2}{n^3} \sqrt{\frac{(n-1)!}{a_0^3 n!}} e^{-r/na_0} L_{n-1}^1 \left(\frac{2r}{na_0}\right), \quad \text{(XIV.181)}$$

$$R_{n1}(r) = \frac{4}{n^3} \sqrt{\frac{(n-2)!}{a_0^3 (n+1)!}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/na_0} L_{n-2}^3 \left(\frac{2r}{na_0}\right), \quad \text{(XIV.182)}$$

$$R_{n2}(r) = \frac{8}{n^4} \sqrt{\frac{(n-3)!}{a_0^3 (n+2)!}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/na_0} L_{n-3}^5 \left(\frac{2r}{na_0}\right). \quad \text{(XIV.183)}$$

Haremos explícitamente uno de los cálculos requeridos, como ilustración. Tenemos, por ejemplo,

$$\int_0^\infty R_{21}(r) R_{n2}(r) r^3 dr =$$

$$= \frac{4}{n^4} \sqrt{\frac{(n-3)!}{6(n+2)!}} \int_0^\infty \left(\frac{r}{a_0}\right)^6 e^{-(2+n)r/2na_0} L_{n-3}^5 \left(\frac{2r}{na_0}\right) dr \quad \text{(XIV.184)}$$

expresión que con el cambio de variable $x = r/a_0$ se reduce a

$$\int_0^\infty R_{21}(r) R_{n2}(r)\ r^3\, dr = \frac{4a_0}{n^4}\sqrt{\frac{(n-3)!}{6(n+2)!}}\int_0^\infty x^6 e^{-(2+n)x/2n} L_{n-3}^5\left(\frac{2x}{n}\right) dx. \tag{XIV.185}$$

Para realizar la integral es conveniente utilizar la expresión (TA.52),

$$L_n^k(x) = \sum_{s=0}^{n}(-1)^s \frac{(n+k)!}{(n-s)!\,(k+s)!s!} x^s, \tag{XIV.186}$$

con lo que se obtiene

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty R_{21}(r) R_{n2}(r)\ r^3\, dr &= \frac{4a_0}{n^4}\sqrt{\frac{(n-3)!\,(n+2)!}{6}} \\
&\quad \times \sum_{s=0}^{n-3}(-1)^s \frac{1}{(n-3-s)!\,(5+s)!s!} \\
&\quad \times \left(\frac{2}{n}\right)^s \int_0^\infty x^{6+s} e^{-(2+n)x/2n}\, dx \\
&= \frac{4a_0}{n^4}\sqrt{\frac{(n-3)!\,(n+2)!}{6}} \sum_{s=0}^{n-3}\frac{(-1)^s}{(n-3-s)!\,(5+s)!s!} \\
&\quad \times \left(\frac{2}{n}\right)^s \left(\frac{2n}{2+n}\right)^{7+s}(6+s)! \\
&= \frac{4a_0}{n^4}\left(\frac{2n}{2+n}\right)^7 \sqrt{\frac{(n+2)!}{6(n-3)!}} \\
&\quad \times \sum_{s=0}^{n-3}(-1)^s \binom{n-3}{s}\left(\frac{4}{2+n}\right)^s (6+s).
\end{aligned} \tag{XIV.187}$$

Del desarrollo

$$(1-x)^n = \sum_{s=0}^{n}(-1)^s \binom{n}{s} x^s \tag{XIV.188}$$

sigue que

$$-nx(1-x)^{n-1} = \sum_{s=0}^{n}(-1)^s \binom{n}{s} s x^s,$$

y

$$(1-x)^{n-1}[a-(n+a)x] = \sum_{s=0}^{n}(-1)^s \binom{n}{s}(a+s)x^s, \tag{XIV.189}$$

lo que permite escribir la integral buscada en forma cerrada,

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty R_{21}(r) R_{n2}(r)\ r^3\, dr \\
&\qquad = 4a_0 n^3 \left(\frac{2}{2+n}\right)^7 \sqrt{\frac{(n+2)!}{6(n-3)!}}\left(\frac{n-2}{n+2}\right)^{n-4}\frac{2n}{n+2} \\
&\qquad = \frac{2^{10}n^4 a_0}{\sqrt{6}}\left[n\left(n^2-1\right)\left(n^2-4\right)\right]^{1/2}\frac{(n-2)^{n-4}}{(n+2)^{n+4}}, \quad n \neq 2.
\end{aligned} \tag{XIV.190}$$

Procediendo de forma análoga se obtiene para $n \neq 2$,

$$\int_0^\infty R_{21}(r)\, R_{n0}(r)\ r^3\, dr = 2^8 n^4 a_0 \sqrt{\frac{n}{6}} \frac{(n-2)^{n-3}}{(n+2)^{n+3}}, \tag{XIV.191}$$

$$\int_0^\infty R_{20}(r)\, R_{n1}(r)\ r^3\, dr = 2^8 n^3 a_0 \left[2n\left(n^2-1\right)\right]^{1/2} \frac{(n-2)^{n-3}}{(n+2)^{n+3}}, \tag{XIV.192}$$

con lo cual

$$\left\langle 200 \mid \hat{V} \mid n10 \right\rangle = -\frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{3}} 2^8 n^3 a_0 \left[2n\left(n^2-1\right)\right]^{1/2} \frac{(n-2)^{n-3}}{(n+2)^{n+3}}, \tag{XIV.193}$$

$$\begin{aligned} \left\langle 21-1 \mid \hat{V} \mid n2-1 \right\rangle &= \left\langle 211 \mid \hat{V} \mid n21 \right\rangle \\ &= -\frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{30}} 2^{10} n^4 a_0 \left[n\left(n^2-1\right)\left(n^2-4\right)\right]^{1/2} \frac{(n-2)^{n-4}}{(n+2)^{n+4}}, \end{aligned} \tag{XIV.194}$$

$$\left\langle 210 \mid \hat{V} \mid n'00 \right\rangle = -\frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{3}} 2^8 n^4 a_0 \sqrt{\frac{n}{6}} \frac{(n-2)^{n-3}}{(n+2)^{n+3}}, \tag{XIV.195}$$

$$\begin{aligned} \left\langle 210 \mid \hat{V} \mid n'20 \right\rangle &= -\frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{90}} 2^{11} n^4 a_0 \left[n\left(n^2-1\right)\left(n^2-4\right)\right]^{1/2} \\ &\quad \times \frac{(n-2)^{n-4}}{(n+2)^{n+4}}. \end{aligned} \tag{XIV.196}$$

De estos resultados sigue finalmente que las correcciones a la energía a segundo orden son

$$\delta E_{2a}^{(2)} = \frac{2^{20}}{3} a_0^3 \mathcal{E}^2 \sum_{n\neq 2} \frac{n^9\left(n^2-1\right)}{(4-n^2)} \frac{(n-2)^{2n-6}}{(n+2)^{2n+6}}, \tag{XIV.197}$$

$$\delta E_{2b}^{(2)} = -\frac{2^{22}}{15} a_0^3 \mathcal{E}^2 \sum_{n\neq 2} n^{11}\left(n^2-1\right) \frac{(n-2)^{2n-8}}{(n+2)^{2n+8}}, \tag{XIV.198}$$

$$\begin{aligned} \delta E_{nc}^{(2)} &= \frac{8}{3} a_0^3 \mathcal{E}^2 \sum_{n\neq 2} \frac{n^2}{(4-n^2)} \left[2^{15} n^9 \frac{(n-2)^{2n-6}}{3\,(n+2)^{2n+6}}\right. \\ &\quad \left. + \frac{2^{21} n^9}{15}\left(n^2-1\right)\left(n^2-4\right) \frac{(n-2)^{2n-8}}{(n+2)^{2n+8}}\right], \end{aligned} \tag{XIV.199}$$

$$\delta E_{nd}^{(2)} = -\frac{2^{22}}{15} a_0^3 \mathcal{E}^2 \sum_{n\neq 2} n^{11}\left(n^2-1\right) \frac{(n-2)^{2n-8}}{(n+2)^{2n+8}}. \tag{XIV.200}$$

XIV.14 Calcule los elementos de matriz V_{ij} para los dos osciladores acoplados estudiados en la sección 14.4 del texto y dados por las ecuaciones (T14.61) y (T14.62).

En la sección 14.4 del texto se consideran dos osciladores iguales oscilando sobre ejes ortogonales Ox y Oy, acoplados por el potencial

$$V = m\omega^2 \beta xy. \tag{XIV.201}$$

Se solicita determinar los elementos de matriz de este potencial, el cual será tomado como una perturbación.

La función de onda no perturbada es $\psi_{n_1}(x)\,\psi_{n_2}(y)$, a la que corresponde la energía

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega\,(n_1 + n_2 + 1) = \hbar\omega\,(n+1)\,, \tag{XIV.202}$$

la que depende sólo del número cuántico n, dado por

$$n = n_1 + n_2. \tag{XIV.203}$$

Como n_1 puede tomar los valores $0, 1, 2, \ldots, n$, mientras n_2 toma los valores n, $n-1$, $n-2$, …, 0, el nivel de energía E_n posee degeneración de orden $g = n+1$. Los correspondientes vectores no perturbados los denotaremos como $|n_i\rangle$, con

$$|n_i\rangle \equiv |n_{1i}\rangle\,|n_{2i}\rangle = |i-1\rangle\,|n-i+1\rangle\,, \quad i = 1, 2, \ldots n+1. \tag{XIV.204}$$

Convenimos en que el primer ket del producto se refiere al oscilador x (en este caso, con $n_1 = i-1$), y el segundo, al oscilador y (con $n_2 = n-i+1$). Con esta convención los elementos de matriz del potencial de acoplamiento $V_{ij} = \langle n_i \mid V \mid n_j\rangle$ resultan

$$\begin{aligned} V_{ij} &= m\omega^2\beta\,\langle n-i+1|\,\langle i-1|\,xy\,|j-1\rangle\,|n-j+1\rangle \\ &= m\omega^2\beta\,\langle i-1 \mid x \mid j-1\rangle\,\langle n-i+1 \mid y \mid n-j+1\rangle\,. \end{aligned} \tag{XIV.205}$$

Utilizando los resultados (T11.37), (T11.38) obtenidos en el capítulo 11,

$$\langle k-1 \mid x \mid k\rangle = \langle k \mid x \mid k-1\rangle = \sqrt{\frac{\hbar k}{2m\omega}}, \tag{XIV.206}$$

resulta

$$\begin{aligned} V_{ij} &= \tfrac{1}{2}\hbar\omega\beta\left(\sqrt{j-1}\delta_{j,i+1} + \sqrt{j}\delta_{j,i-1}\right)\left(\sqrt{n-j+1}\delta_{j,i-1} + \sqrt{n-j+2}\delta_{j,i+1}\right) \\ &= \tfrac{1}{2}\hbar\omega\beta\left(\sqrt{i}\delta_{j,i+1} + \sqrt{i-1}\delta_{j,i-1}\right)\left(\sqrt{n-i+2}\delta_{j,i-1} + \sqrt{n-i+1}\delta_{j,i+1}\right). \end{aligned} \tag{XIV.207}$$

De aquí sigue que los únicos elementos de matriz no nulos son aquellos en los que i y j difieren por la unidad, es decir,

$$V_{i,i+1} = \tfrac{1}{2}\beta\hbar\omega\sqrt{i\,(n-i+1)}, \tag{XIV.208}$$

$$V_{i,i-1} = \tfrac{1}{2}\beta\hbar\omega\sqrt{(i-1)\,(n-i+2)}. \tag{XIV.209}$$

XIV.15 Calcule las correcciones a la energía a segundo orden de la teoría de perturbaciones para los casos $n = 1, 2$ de los dos osciladores estudiados en el problema anterior.

Denotamos los eigenestados no perturbados del problema de los osciladores acoplados, estudiado en la sección 14.4 del texto y en el problema anterior, por $|n\rangle = |n_1\rangle\,|n_2\rangle = |n_1\,n_2\rangle$; a ellos corresponde la energía $E_n = \hbar\omega\,(n_1 + n_2 + 1) = \hbar\omega\,(n+1)$. A $n = 1$, ($E_1^{(0)} = 2\hbar\omega$, primer estado excitado) corresponden los dos estados

$$|a\rangle = |0\rangle\,|1\rangle\,, \quad |b\rangle = |1\rangle\,|0\rangle\,, \tag{XIV.210}$$

denotados como $|a\rangle = |i=1\rangle\,, |b\rangle = |i=2\rangle$ en el problema anterior. En general, si denotamos por $|n'\rangle = |n'_1\, n'_2\rangle$ a un estado arbitrario del sistema no perturbado, los elementos de matriz de la perturbación son de la forma

$$\begin{aligned} V_{nn'} &= \langle n \mid m\omega^2\beta xy \mid n'\rangle = m\omega^2\beta \langle n_1 \mid x \mid n'_1\rangle \langle n_2 \mid y \mid n'_2\rangle \\ &= \tfrac{1}{2}\beta\hbar\omega \left[\sqrt{n'_1 n'_2}\delta_{n_1,n'_1-1}\delta_{n_2,n'_2-1} + \sqrt{n'_1\,(n'_2+1)}\delta_{n_1,n'_1-1}\delta_{n_2,n'_2+1}\right. \\ &\quad \left. + \sqrt{n'_2\,(n'_1+1)}\delta_{n_1,n'_1+1}\delta_{n_2,n'_2-1} + \sqrt{(n'_1+1)\,(n'_2+1)}\delta_{n_1,n'_1+1}\delta_{n_2,n'_2+1}\right]. \end{aligned} \tag{XIV.211}$$

La ecuación secular que da la corrección a la energía a segundo orden para un estado n doblemente degenerado, es

$$\begin{vmatrix} \sum_l{}' \frac{|V_{al}|^2}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} - \delta E_n^{(2)} & \sum_l{}' \frac{V_{al}V_{lb}}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} \\ \sum_l{}' \frac{V_{bl}V_{l\,a}}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum_l{}' \frac{|V_{bl}|^2}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} - \delta E_n^{(2)} \end{vmatrix} = 0, \tag{XIV.212}$$

en donde a y b denotan los eigenestados degenerados y la prima sobre la suma significa sumar sobre todos los estados l del sistema con $l \neq a$ y $l \neq b$. Los únicos elementos de matriz entre estados del nivel 1 y fuera del nivel 1 diferentes de cero son

$$\langle 0\,1 \mid V \mid 1\,2\rangle = \langle 12 \mid V \mid 01\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\beta\hbar\omega, \tag{XIV.213}$$

$$\langle 1\,0 \mid V \mid 2\,1\rangle = \langle 210 \mid V \mid\ 10\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\beta\hbar\omega, \tag{XIV.214}$$

donde a los estados $|1\,2\rangle$ y $|2\,1\rangle$ corresponde la energía $E^{(0)} = 4\hbar\omega$. Con sólo ellos la ecuación secular (XIV.212) se reduce a

$$\begin{vmatrix} -\frac{1}{4}\hbar\omega\beta^2 - \delta E_1^{(2)} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4}\hbar\omega\beta^2 - \delta E_1^{(2)} \end{vmatrix} = 0. \tag{XIV.215}$$

Las dos raíces son iguales y dan

$$\delta E_1^{(2)} = -\tfrac{1}{4}\hbar\omega\beta^2. \tag{XIV.216}$$

Luego, hasta segundo orden de la teoría de perturbaciones inclusive, las energías que corresponden al primer estado excitado son

$$E_1 = E_1^{(0)} + \left\{ \begin{array}{c} \frac{1}{2}\hbar\omega\beta \\ \\ -\frac{1}{2}\hbar\omega\beta \end{array} \right\} - \tfrac{1}{4}\hbar\omega\beta^2. \tag{XIV.217}$$

Los estados con $n = 2$ son triplemente degenerados; ellos son (en las diversas notaciones empleadas hasta aquí)

$$|1\rangle = |a\rangle = |0\rangle\,|2\rangle\,, \quad |2\rangle = |b\rangle = |1\rangle\,|1\rangle\,, \quad |3\rangle = |c\rangle = |2\rangle\,|0\rangle\,, \tag{XIV.218}$$

y les corresponde la energía $E_2^{(0)} = 3\hbar\omega$. La ecuación secular toma la forma

$$\begin{vmatrix} \sum_l{}' \frac{|V_{al}|^2}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} - \delta E_n^{(2)} & \sum_l{}' \frac{V_{al}V_{lb}}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum_l{}' \frac{V_{al}V_{lc}}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} \\ \sum_l{}' \frac{V_{bl}V_{la}}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum_l{}' \frac{|V_{bl}|^2}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} - \delta E_n^{(2)} & \sum_l{}' \frac{V_{bl}V_{lc}}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} \\ \sum_l{}' \frac{V_{cl}V_{la}}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum_l{}' \frac{V_{cl}V_{lb}}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} & \sum_l{}' \frac{|V_{cl}|^2}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}} - \delta E_n^{(2)} \end{vmatrix} = 0, \tag{XIV.219}$$

donde la prima sobre la suma indica excluir los estados a, b y c. Los únicos elementos de matriz diferentes de cero son ahora

$$\langle 0\,2 \mid V \mid 1\,3\rangle = \langle 13 \mid V \mid 02\rangle = \tfrac{\sqrt{3}}{2}\beta\hbar\omega, \tag{XIV.220}$$

$$\langle 1\,1 \mid V \mid 2\,2\rangle = \langle 22 \mid V \mid 11\rangle = \beta\hbar\omega, \tag{XIV.221}$$

$$\langle 1\,1 \mid V \mid 0\,0\rangle = \langle 00 \mid V \mid 11\rangle = \tfrac{1}{2}\beta\hbar\omega, \tag{XIV.222}$$

$$\langle 2\,0 \mid V \mid 3\,1\rangle = \langle 3\,1 \mid V \mid 20\rangle = \tfrac{\sqrt{3}}{2}\beta\hbar\omega. \tag{XIV.223}$$

A los estados $|13\rangle, |31\rangle$ y $|22\rangle$ corresponde la energía $E^{(0)} = 5\hbar\omega$ y al $|00\rangle$, $E^{(0)} = \hbar\omega$. La ecuación secular se reduce a

$$\begin{vmatrix} -\frac{3}{8}\hbar\omega\beta^2 - \delta E_2^{(2)} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{3}{8}\hbar\omega\beta^2 - \delta E_2^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{3}{8}\hbar\omega\beta^2 - \delta E_2^{(2)} \end{vmatrix} = 0. \tag{XIV.224}$$

Una vez más, hay una única raíz, triple en el presente caso, de valor

$$\delta E_2^{(2)} = -\tfrac{3}{8}\hbar\omega\beta^2, \tag{XIV.225}$$

indicando que al igual que en el caso anterior, la corrección a los tres niveles es la misma.

La corrección a la energía a primer orden para los niveles $n = 2$ se obtiene en el siguiente problema, como parte del proceso para construir las funciones de onda correctas; estas últimas para el caso $n = 1$ se construyen en la sección 14.4 del texto.

XIV.16 Derive detalladamente las funciones de onda correctas para el caso $n = 2$ (las expresiones (T14.71)) de los osciladores estudiados en los problemas XIV.4 y XIV.5.

El sistema de ecuaciones a resolver es el dado por la ecuación (T14.44)

$$\sum_{n_s} \left(V_{n_j n_s} - \delta E_{n_i}^{(1)} \delta_{n_j n_s} \right) A_{n_i n_s} = 0, \tag{XIV.226}$$

donde el índice $n_k, k = 1, 2, \ldots g$, se refiere a los estados degenerados en estudio y $A_{n_i n_s}$ son los elementos de la matriz que lleva de la base inicial no perturbada ψ a la base correcta $\varphi = A\psi$, como se expresa en la ecuación (T14.48). En el problema XIV.14 se vio que los únicos elementos de matriz no nulos del potencial de

perturbación entre estados degenerados están dados por las ecuaciones (XIV.208) y (XIV.209), donde los estados de interés para $n = 2$ son los dados en (XIV.218). Explícitamente, se tiene

$$V_{12} = V_{21} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\beta\hbar\omega = \sqrt{2}V_0, \tag{XIV.227}$$

$$V_{23} = V_{32} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\beta\hbar\omega = \sqrt{2}V_0. \tag{XIV.228}$$

La ecuación secular (T14.45) que garantiza la existencia de soluciones no triviales para el sistema (XIV.226) resulta ser

$$\begin{vmatrix} -\delta E_2^{(1)} & \sqrt{2}V_0 & 0 \\ \sqrt{2}V_0 & -\delta E_2^{(1)} & \sqrt{2}V_0 \\ 0 & \sqrt{2}V_0 & -\delta E_2^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \tag{XIV.229}$$

es decir, desarrollando,

$$\delta E_2^{(1)}\left[\left(\delta E_2^{(1)}\right)^2 - 4V_0^2\right] = 0. \tag{XIV.230}$$

Las correcciones a la energía a primer orden resultan así

$$\begin{aligned} i = 1, &\quad \delta E_2^{(1)} = -2V_0, \\ i = 2, &\quad \delta E_2^{(1)} = 0, \\ i = 3, &\quad \delta E_2^{(1)} = 2V_0. \end{aligned} \tag{XIV.231}$$

Sustituyendo cada uno de estos valores de $\delta E_2^{(1)}$ en el sistema (XIV.226) encontraremos los coeficientes A_{ij} que determinan las funciones de onda correctas. Sustituyendo primero la solución $\delta E_{2_1}^{(1)} = -2V_0$ en (XIV.226) se obtiene

$$\begin{gathered} 2V_0A_{11} + \sqrt{2}V_0A_{12} = 0, \\ \sqrt{2}V_0A_{11} + 2V_0A_{12} + \sqrt{2}V_0A_{13} = 0, \\ \sqrt{2}V_0A_{12} + 2V_0A_{13} = 0, \end{gathered} \tag{XIV.232}$$

de donde sigue que

$$A_{12} = -\sqrt{2}A_{11}, \quad A_{13} = A_{11}. \tag{XIV.233}$$

Por lo tanto, a esta energía corresponde el eigenestado, ya normalizado,

$$|2_1\rangle = \tfrac{1}{2}\left(|0\rangle\,|2\rangle - \sqrt{2}\,|1\rangle\,|1\rangle + |2\rangle\,|0\rangle\right). \tag{XIV.234}$$

En forma análoga, para $\delta E_{2_2}^{(1)} = 0$ el sistema (XIV.226) se reduce a

$$\begin{gathered} \sqrt{2}V_0A_{22} = 0, \\ \sqrt{2}V_0A_{21} + \sqrt{2}V_0A_{23} = 0, \\ \sqrt{2}V_0A_{22} = 0. \end{gathered} \tag{XIV.235}$$

De aquí sigue que

$$A_{22} = 0, \quad A_{23} = -A_{21}. \tag{XIV.236}$$

Así pues, a esta energía corresponde el eigenestado

$$|2_2\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle\,|2\rangle - |2\rangle\,|0\rangle\right). \tag{XIV.237}$$

Por último, para $\delta E^{(1)}_{2_3} = 2V_0$ se obtiene

$$\begin{gathered} -2V_0A_{31} + \sqrt{2}V_0A_{32} = 0, \\ \sqrt{2}V_0A_{31} - 2V_0A_{32} + \sqrt{2}V_0A_{33} = 0, \\ \sqrt{2}V_0A_{32} - 2V_0A_{33} = 0, \end{gathered} \tag{XIV.238}$$

y

$$A_{32} = \sqrt{2}A_{31}, \quad A_{33} = A_{31}. \tag{XIV.239}$$

Por lo tanto, a esta energía le corresponde el eigenestado

$$|2_3\rangle = \tfrac{1}{2}\left(|0\rangle\,|2\rangle + \sqrt{2}\,|1\rangle\,|1\rangle + |2\rangle\,|0\rangle\right). \tag{XIV.240}$$

XIV.17 Investigue las funciones de onda correctas del problema anterior para $n = 2$, comparándolas con las de los modos normales.

En la representación de coordenadas, las funciones de onda correctas para $n = 2$ encontradas en el problema anterior se escriben como sigue con $\psi_{2_s}(x, y) = \psi_s(x, y)$, $s = 1, 2, 3$:

$$\psi_1(x,y) = \tfrac{1}{2}\left[\psi_0(x)\,\psi_2(y) - \sqrt{2}\psi_1(x)\,\psi_1(y) + \psi_2(x)\,\psi_0(y)\right], \tag{XIV.241}$$

$$\psi_2(x,y) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_0(x)\,\psi_2(y) - \psi_2(x)\,\psi_0(y)\right], \tag{XIV.242}$$

$$\psi_3(x,y) = \tfrac{1}{2}\left[\psi_0(x)\,\psi_2(y) + \sqrt{2}\psi_1(x)\,\psi_1(y) + \psi_2(x)\,\psi_0(y)\right]. \tag{XIV.243}$$

Introduciendo aquí las funciones de onda del oscilador armónico

$$\psi_n(x) = C_n e^{-x^2/2\alpha_0^2} H_n(x/\alpha_0), \tag{XIV.244}$$

con $C_n = \left(\sqrt{\pi}\alpha_0 2^n n!\right)^{-\frac{1}{2}}$ y $\alpha_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$, se obtiene

$$\begin{aligned} \psi_1(x,y) &= \tfrac{1}{2}\exp\left[-\frac{1}{2\alpha_0^2}\left(x^2+y^2\right)\right]\Big\{C_0C_2H_0(x/\alpha_0)H_2(y/\alpha_0) \\ &\quad -\sqrt{2}C_1^2H_1(x/\alpha_0)H_1(y/\alpha_0) + C_0C_2H_2(x/\alpha_0)H_0(y/\alpha_0)\Big\}, \end{aligned} \tag{XIV.245}$$

$$\begin{aligned} \psi_2(x,y) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\exp\left[-\frac{1}{2\alpha_0^2}\left(x^2+y^2\right)\right]\Big\{C_0C_2H_0(x/\alpha_0)H_2(y/\alpha_0) \\ &\quad -C_0C_2H_2(x/\alpha_0)H_0(y/\alpha_0)\Big\}, \end{aligned} \tag{XIV.246}$$

$$\begin{aligned} \psi_3(x,y) &= \tfrac{1}{2}\exp\left[-\frac{1}{2\alpha_0^2}\left(x^2+y^2\right)\right]\Big\{C_0C_2H_0(x/\alpha_0)H_2(y/\alpha_0) \\ &\quad +\sqrt{2}C_1^2H_1(x/\alpha_0)H_1(y/\alpha_0) + C_0C_2H_2(x/\alpha_0)H_0(y/\alpha_0)\Big\}. \end{aligned} \tag{XIV.247}$$

Tomando en cuenta que

$$C_1^2 = \sqrt{2}C_0C_2 = \left(2\sqrt{\pi}\alpha_0\right)^{-1} \tag{XIV.248}$$

y que

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = 4x^2 - 2,$$

estas funciones de onda pueden expresarse como

$$\psi_1(x,y) = C_0 C_2 \left[\frac{2}{\alpha_0^2}(x-y)^2 - 2\right] \exp\left[-\frac{1}{2\alpha_0^2}\left(x^2+y^2\right)\right], \tag{XIV.249}$$

$$\psi_2(x,y) = -C_1^2 \left[\frac{2}{\alpha_0^2}\left(x^2-y^2\right)\right] \exp\left[-\frac{1}{2\alpha_0^2}\left(x^2+y^2\right)\right], \tag{XIV.250}$$

$$\psi_3(x,y) = C_0 C_2 \left[\frac{2}{\alpha_0^2}(x+y)^2 - 2\right] \exp\left[-\frac{1}{2\alpha_0^2}\left(x^2+y^2\right)\right]. \tag{XIV.251}$$

Introducimos ahora las coordenadas normales x_1, x_2 definidas mediante la ecuación (T14.72), es decir,

$$x = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), \quad y = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2). \tag{XIV.252}$$

De aquí sigue que

$$x^2 + y^2 = x_1^2 + x_2^2, \tag{XIV.253}$$

$$x^2 - y^2 = 2x_1 x_2, \tag{XIV.254}$$

$$xy = \tfrac{1}{2}\left(x_1^2 - x_2^2\right), \tag{XIV.255}$$

y, por lo tanto,

$$\psi_1(x,y) = C_0 C_2 \left(4\frac{x_2^2}{\alpha_0^2} - 2\right) \exp\left[-\frac{1}{2\alpha_0^2}\left(x_1^2+x_2^2\right)\right], \tag{XIV.256}$$

$$\psi_2(x,y) = -C_1^2 \left(4\frac{x_1 x_2}{\alpha_0^2}\right) \exp\left[-\frac{1}{2\alpha_0^2}\left(x_1^2+x_2^2\right)\right], \tag{XIV.257}$$

$$\psi_3(x,y) = C_0 C_2 \left(4\frac{x_1^2}{\alpha_0^2} - 2\right) \exp\left[-\frac{1}{2\alpha_0^2}\left(x_1^2+x_2^2\right)\right]. \tag{XIV.258}$$

Escribiendo estos resultados en términos de polinomios de Hermite, característicos de los osciladores armónicos, se obtiene

$$\psi_1(x,y) = C_0 C_2 \exp\left[-\frac{1}{2\alpha_0^2}\left(x_1^2+x_2^2\right)\right] H_0\left(\frac{x_1}{\alpha_0}\right) H_2\left(\frac{x_2}{\alpha_0}\right), \tag{XIV.259}$$

$$\psi_2(x,y) = -C_1^2 \exp\left[-\frac{1}{2\alpha_0^2}\left(x_1^2+x_2^2\right)\right] H_1\left(\frac{x_1}{\alpha_0}\right) H_1\left(\frac{x_2}{\alpha_0}\right), \tag{XIV.260}$$

$$\psi_3(x,y) = C_0 C_2 \exp\left[-\frac{1}{2\alpha_0^2}\left(x_1^2+x_2^2\right)\right] H_2\left(\frac{x_1}{\alpha_0}\right) H_0\left(\frac{x_2}{\alpha_0}\right). \tag{XIV.261}$$

O mejor,

$$\psi_1(x,y) = \psi_0(x_1)\,\psi_2(x_2), \tag{XIV.262}$$

$$\psi_2(x,y) = -\psi_1(x_1)\,\psi_1(x_2), \tag{XIV.263}$$

$$\psi_3(x,y) = \psi_2(x_1)\,\psi_0(x_2), \tag{XIV.264}$$

en donde cada uno de los factores es una función de onda de oscilador armónico.

Vemos que, al igual que sucede en el caso $n = 1$, las funciones de onda correctas corresponden a estados de excitación bien definidos de los modos normales. En el caso $i = 1$ la función de onda correcta corresponde al estado base del modo normal 1 y al segundo estado excitado para el modo normal 2. Para $i = 2$ la función de onda correcta corresponde a tener a ambos modos normales en el primer estado excitado. Finalmente, para $i = 3$ el modo normal 1 se encuentra en el segundo estado excitado, mientras que el modo normal 2 se encuentra en el estado base. Así pues, la transformación unitaria A conduce de una descripción de dos partículas acopladas con coordenadas x, y, a la descripción en términos de dos cuasi-partículas asociadas a los modos normales x_1, x_2, es decir, a la única descripción en que las dos coordenadas son independientes.

XIV.18 Dos osciladores acoplados tienen el hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \tfrac{1}{2}m\omega_1^2 x_1^2 + \tfrac{1}{2}m\omega_2^2 x_2^2 + m\omega^2\beta x_1 x_2,$$

en donde $\omega^2 = \omega_1\omega_2$ y β es arbitraria. Trate este problema con métodos perturbativos cuando:

a) ω_1/ω_2 es un número irracional;

b) ω_1/ω_2 es un número racional.

Resuelva el problema exactamente y compare resultados.

Escribimos el hamiltoniano en la forma usual de la teoría de perturbaciones:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad \hat{H}' = m\omega^2\beta x_1 x_2. \tag{XIV.265}$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \tfrac{1}{2}m\omega_1^2 x_1^2 + \tfrac{1}{2}m\omega_2^2 x_2^2 \tag{XIV.266}$$

es el hamiltoniano del sistema no perturbado, que describe dos osciladores armónicos independientes. Las funciones de onda no perturbadas son

$$\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2), \tag{XIV.267}$$

con las $\psi_{n_i}(x_i)$ dadas por la ecuación (XIV.244) y valores propios de la energía

$$E^{(0)}_{n_1 n_2} = \hbar\omega_1\left(n_1 + \tfrac{1}{2}\right) + \hbar\omega_2\left(n_2 + \tfrac{1}{2}\right), \quad n_1, n_2 = 0, 1, 2, \ldots \tag{XIV.268}$$

Cuando la razón de las frecuencias $\zeta = \omega_2/\omega_1$ es un número irracional estos niveles de energía son no degenerados; pero cuando ζ es racional podemos escribir, poniendo $\zeta = N_2/N_1$, con N_1, N_2 enteros,

$$E^{(0)}_{n_1 n_2} = \frac{\hbar\omega_1}{N_1}\left(N_1 n_1 + N_2 n_2\right) + \frac{\hbar\omega_1}{2N_1}\left(N_1 + N_2\right), \tag{XIV.269}$$

expresión que muestra que (aparte de parámetros) $E^{(0)}_{n_1 n_2}$ depende en realidad de un único entero $N_1 n_1 + N_2 n_2$, el cual se puede construir con diversas combinaciones de n_1 y n_2, por lo que el nivel resulta degenerado.

Nos concentraremos primero en el caso no degenerado, con cociente de frecuencias irracional. Denotando con $|n_1 n_2\rangle = |n_1\rangle\,|n_2\rangle$ a los eigenestados, los elementos de matriz de la perturbación resultan

$$\begin{aligned}\left\langle n_1 n_2 \mid \hat{H}' \mid n_1' n_2' \right\rangle &= m\omega^2\beta \left\langle n_1 n_2 \mid x_1 x_2 \mid n_1' n_2' \right\rangle \\ &= m\omega^2\beta \left\langle n_1 \mid x_1 \mid n_1' \right\rangle \left\langle n_2 \mid x_2 \mid n_2' \right\rangle . \quad \text{(XIV.270)}\end{aligned}$$

Utilizamos la ecuación (XIV.211) para determinar los elementos de matriz no nulos:

$$\left\langle n_1 n_2 \mid \hat{H}' \mid n_1+1, n_2+1 \right\rangle = \tfrac{1}{2}\beta\hbar\omega\sqrt{(n_1+1)(n_2+1)}, \quad \text{(XIV.271)}$$

$$\left\langle n_1 n_2 \mid \hat{H}' \mid n_1-1, n_2+1 \right\rangle = \tfrac{1}{2}\beta\hbar\omega\sqrt{n_1(n_2+1)}, \quad \text{(XIV.272)}$$

$$\left\langle n_1 n_2 \mid \hat{H}' \mid n_1+1, n_2-1 \right\rangle = \tfrac{1}{2}\beta\hbar\omega\sqrt{(n_1+1)n_2}, \quad \text{(XIV.273)}$$

$$\left\langle n_1 n_2 \mid \hat{H}' \mid n_1-1, n_2-1 \right\rangle = \tfrac{1}{2}\beta\hbar\omega\sqrt{n_1 n_2}, \quad \text{(XIV.274)}$$

más los correspondientes elementos de la matriz traspuesta.

A primer orden de la teoría de perturbacions no hay corrección a la energía, pues los elementos de matriz diagonales son nulos, $\left\langle n_1 n_2 \mid \hat{H}' \mid n_1 n_2 \right\rangle = 0$, por lo que necesitamos pasar a segundo orden. Aplicando la ecuación (T14.18), sigue que

$$\begin{aligned}\delta E^{(2)}_{n_1 n_2} &= {\sum}' \frac{\left|\hat{H}'_{n_1 n_2, n_1' n_2'}\right|^2}{E^{(0)}_{n_1 n_2} - E^{(0)}_{n_1' n_2'}} \\ &= \tfrac{1}{4}\beta^2\hbar\omega^2\Big[-\frac{(n_1+1)(n_2+1)}{\omega_1+\omega_2} + \frac{n_1(n_2+1)}{\omega_1-\omega_2} \\ &\quad -\frac{(n_1+1)n_2}{\omega_1-\omega_2} + \frac{n_1 n_2}{\omega_1+\omega_2}\Big], \quad \text{(XIV.275)}\end{aligned}$$

o bien, simplificando,

$$\delta E^{(2)}_{n_1 n_2} = \tfrac{1}{4}\beta^2\hbar\omega^2 \left(\frac{n_1-n_2}{\omega_1-\omega_2} - \frac{1+n_1+n_2}{\omega_1+\omega_2}\right). \quad \text{(XIV.276)}$$

Para encontrar las funciones de onda a primer orden usamos la fórmula (T14.16), que determina los coeficientes de la superposición apropiada a primer orden,

$$C_{nn'} = \frac{\hat{H}'_{n_1' n_2', n_1 n_2}}{E^{(0)}_{n_1 n_2} - E^{(0)}_{n_1' n_2'}}, \quad \text{(XIV.277)}$$

para obtener

$$\begin{aligned}\Psi_{n_1 n_2} &= \psi^{(0)}_{n_1 n_2} + \tfrac{1}{2}\beta\omega\Bigg[-\frac{\sqrt{(n_1+1)(n_2+1)}}{\omega_1+\omega_2}\psi^{(0)}_{n_1+1,n_2+1} \\ &\quad + \frac{\sqrt{n_1(n_2+1)}}{\omega_1-\omega_2}\psi^{(0)}_{n_1-1,n_2+1} - \frac{\sqrt{(n_1+1)n_2}}{\omega_1-\omega_2}\psi^{(0)}_{n_1+1,n_2-1} \\ &\quad + \frac{\sqrt{n_1 n_2}}{\omega_1+\omega_2}\psi^{(0)}_{n_1-1,n_2-1}\Bigg]. \quad \text{(XIV.278)}\end{aligned}$$

El caso degenerado se reduce esencialmente a lo visto en la sección 14.4 del texto y en los problemas XIV.14–XIV.17, por lo que no se desarrolla más aquí el tema.

La solución exacta de este problema se estudia brevemente en la sección 11.7 del texto y en el problema XI.22. Esta solución se obtiene usando como variables x y X a la pareja que corresponde a los modos normales del sistema, y que se obtiene haciendo una transformación ortogonal con una matriz $\hat{a}$ de elementos a_{ij}, de tal forma que se puede escribir

$$X = a_{11}x_1 + a_{12}x_2, \quad x = a_{21}x + a_{22}x_2, \tag{XIV.279}$$

$$a_1 = a_{11} = a_{22}, \quad a_0 = a_{12} = -a_{21}, \quad a_0^2 + a_1^2 = 1. \tag{XIV.280}$$

Vemos que aún queda un parámetro real libre, que se determina precisamente con la demanda de independencia de los modos normales. En estas coordenadas la energía potencial toma la forma

$$\begin{aligned} V &= \frac{m}{2}\left[(\omega_1^2 a_0^2 + \omega_2^2 a_1^2 - 2\omega^2\beta a_0 a_1)x^2 + (\omega_1^2 a_1^2 + \omega_2^2 a_0^2 + 2\omega^2\beta a_0 a_1)X^2\right] \\ &\quad + m\left[(\omega_2^2 - \omega_1^2)a_0 a_1 + \omega^2\beta(a_1^2 - a_0^2)\right] xX. \end{aligned} \tag{XIV.281}$$

Para desacoplar los osciladores basta demandar que se anule el coeficiente del término cruzado, es decir, que se cumpla la condición

$$\left(\omega_2^2 - \omega_1^2\right) a_0 a_1 + \omega^2\beta\left(a_1^2 - a_0^2\right) = 0. \tag{XIV.282}$$

Esta condición determina el siguiente valor para el coeficiente $\gamma = a_1/a_0$, en función de las frecuencias del sistema y el coeficiente de acoplamiento β (basta usar uno de los signos; el otro simplemente intercambia las soluciones):

$$\gamma = \frac{\omega_2^2 - \omega_1^2 \pm \sqrt{\left(\omega_2^2 - \omega_1^2\right)^2 + 4\omega^4\beta^2}}{2\beta\omega}.$$

Podemos tomar entonces los valores

$$a_0 = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma^2}}, \quad a_1 = \frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma^2}}. \tag{XIV.283}$$

La solución determina también las frecuencias de los modos normales, que de la expresión para V sigue que están dadas por

$$\begin{aligned} \Omega_1^2 &= \omega_x^2 = \omega_1^2 a_0^2 + \omega_2^2 a_1^2 - 2\omega^2\beta a_0 a_1 \\ &= a_0^2(\omega_1^2 + \omega_2^2\gamma^2 - 2\omega^2\beta\gamma), \end{aligned} \tag{XIV.284}$$

$$\begin{aligned} \Omega_1^2 &= \omega_X^2 = \omega_1^2 a_1^2 + \omega_2^2 a_0^2 + 2\omega^2\beta a_0 a_1 \\ &= a_0^2(\omega_1^2\gamma^2 + \omega_2^2 + 2\omega^2\beta\gamma). \end{aligned} \tag{XIV.285}$$

El nuevo hamiltoniano resulta

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) + \frac{m}{2}\omega_X^2 X^2 + \frac{m}{2}\omega_x^2 x^2, \tag{XIV.286}$$

y a él corresponde la función de onda

$$\psi_{Nn} = \phi_N(X)\phi_n(x), \tag{XIV.287}$$

en donde cada factor es una función de onda de oscilador armónico. Los valores propios de la energía son, con $N = n_1$, $n = n_2$,

$$E_{Nn} = \hbar\omega_X \left(n_1 + \tfrac{1}{2}\right) + \hbar\omega_x \left(n_2 + \tfrac{1}{2}\right). \tag{XIV.288}$$

Con el fin de comparar con los resultados proporcionados por el método perturbativo, estudiaremos el caso en que ω_1/ω_2 es un número racional (lo que nos lleva al caso degenerado) y, en particular, tomaremos $\omega_1 = \omega_2$. Para este caso se obtiene

$$\gamma = 1, \quad a_0 = a_1 = \tfrac{1}{\sqrt{2}}, \tag{XIV.289}$$

$$\omega_x^2 = \omega_1^2 (1 - \beta), \quad \omega_X^2 = \omega_1^2 (1 + \beta), \tag{XIV.290}$$

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega_1 \left[\sqrt{1+\beta}\left(n_1 + \tfrac{1}{2}\right) + \sqrt{1-\beta}\left(n_2 + \tfrac{1}{2}\right)\right]. \tag{XIV.291}$$

Definiendo al igual que en el problema XIV.14, $n_1 = i - 1$ y $n_2 = n - i + 1$, esta expresión se reescribe como

$$E_n = \hbar\omega_1 \left[\sqrt{1+\beta}\left(i - \tfrac{1}{2}\right) + \sqrt{1-\beta}\left(n - i + \tfrac{3}{2}\right)\right], \tag{XIV.292}$$

lo que coincide con el resultado dado por (T14.75). Desarrollando esta expresión en serie de Taylor alrededor de $\beta = 0$, para valores pequeños de β se obtiene

$$E_n = \hbar\omega_1 \left[n + 1 - \tfrac{1}{2}\beta (n + 2 - 2i) - \tfrac{1}{2}\beta^2 (n+1) + \cdots\right] \tag{XIV.293}$$

o, reacomodando,

$$E_n^{(i)} = E_n^{(0)} \left(1 - \tfrac{1}{2}\beta^2 + \cdots\right) - \tfrac{1}{2}\beta\hbar\omega_1 (n + 2 - 2i) + \cdots, \quad i = 1, 2, \ldots, n+1. \tag{XIV.294}$$

Las correcciones a primer orden (lineales en β) van desde $(-1/2)\beta\hbar\omega_1$ (para $i = 1$) hasta $(1/2)\beta\hbar\omega_1 n$ (para $i = n+1$), en pasos iguales de valor $\beta\hbar\omega_1$, y producen la ruptura total de la degeneración original. En cambio, las correcciones a segundo orden (proporcionales a β^2) son independientes de i, es decir, iguales para todos los estados degenerados. Para el caso $n = 1$ se obtiene

$$\delta E_{1,2}^{(1)} = \pm\tfrac{1}{2}\beta\hbar\omega_1,$$

mientras que el caso $n = 2$ da

$$\delta E_{1,2,3}^{(1)} = -\beta\hbar\omega_1, 0, \beta\hbar\omega_1.$$

Estos resultados coinciden con los obtenidos anteriormente con la teoría de perturbaciones, como era de esperarse.

XIV.19 Determine el espectro de emisión de los osciladores acoplados del problema anterior y compare con el correspondiente espectro de dos osciladores independientes.

Consideraremos el caso no degenerado, es decir, cuando el cociente de las frecuencias es un número irracional. Dado que no hay correcciones de primer orden, las frecuencias de transición entre los estados $n_1 n_2$, $n_1' n_2'$ son

$$\begin{aligned} \omega' \equiv \omega_{n_1 n_2, n_1' n_2'} &= \frac{1}{\hbar}\left(E_{n_1 n_2} - E_{n_1' n_2'}\right), \\ \omega' &= \frac{1}{\hbar}\left(E_{n_1 n_2}^{(0)} - E_{n_1' n_2'}^{(0)}\right) + \frac{1}{\hbar}\left(\delta E_{n_1 n_2}^{(2)} - \delta E_{n_1' n_2'}^{(2)}\right). \end{aligned} \tag{XIV.295}$$

Sigue de aquí que el acoplamiento produce el corrimiento de frecuencias

$$\begin{aligned}\delta^{(2)}\omega' &= \frac{1}{\hbar}\left(\delta E^{(2)}_{n_1 n_2} - \delta E^{(2)}_{n_1' n_2'}\right) \\ &= \tfrac{1}{4}\beta^2\omega^2\left[\frac{(n_1-n_1')-(n_2-n_2')}{\omega_1-\omega_2} - \frac{(n_1-n_1')+(n_2-n_2')}{\omega_1+\omega_2}\right] \\ &= \tfrac{1}{2}\beta^2\frac{\omega^2}{\omega_1^2-\omega_2^2}\left[\omega_2(n_1-n_1')-\omega_1(n_2-n_2')\right]. \qquad \text{(XIV.296)}\end{aligned}$$

En ausencia de perturbación el espectro de absorción contendría sólo las líneas que corresponden a la regla de selección $n_i' - n_i = 1$ ($n_i' - n_i = 0$ corresponde al caso en que el oscilador no realiza ninguna transición). Sin embargo, en el caso general el acoplamiento entre osciladores afecta ligeramente las reglas de selección (debido a que afecta a los elementos de matriz y a las frecuencias), con lo que el espectro se enriquece considerablemente, aunque las líneas adicionales serían normalmente de muy baja intensidad. Es claro que del estudio de las nuevas frecuencias (que se encuentran desplazadas respecto a las no perturbadas) se puede obtener información sobre los parámetros que caracterizan el potencial de perturbación, es decir, sobre la forma de la interacción. En el presente caso, sin embargo, con el acoplamiento bilineal considerado en los problemas anteriores, las reglas de selección usuales de oscilador armónico siguen vigentes para los modos normales.

XIV.20 Dos osciladores acoplados tienen el hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \tfrac{1}{2}m_1\omega^2 x_1^2 + \tfrac{1}{2}m_2\omega^2 x_2^2 + V_0 e^{-(x_1-x_2)^2/a^2}.$$

Considere los dos casos siguientes y discútalos cualitativa, pero detalladamente:

a) el potencial gaussiano de acoplamiento es suficientemente pequeño para que se le pueda tratar como una perturbación;

b) la frecuencia ω de oscilación es suficientemente baja, como para considerar el potencial gaussiano como dominante.

Calcule la energía de los primeros estados del sistema a primer orden de la teoría de perturbaciones en el caso a) anterior.

a) *Discusión cualitativa.*

La discusión se simplifica si se hace en términos de las variables relativa y de centro de masa

$$x = x_1 - x_2, \quad X = \frac{m_1}{M}x_1 + \frac{m_2}{M}x_2, \qquad \text{(XIV.297)}$$

con $M = m_1+m_2$ y $m = m_1 m_2/M$. No aparece ningún acoplamiento proporcional al producto xX debido a la igualdad de frecuencias de ambos osciladores, que es lo que hace particularmente útil esta transformación de coordenadas en el presente caso. El hamiltoniano se escribe en las nuevas coordenadas como

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{1}{2}M\omega^2 X^2 + \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2 + V_0 e^{-x^2/a^2}. \qquad \text{(XIV.298)}$$

Este hamiltoniano describe un sistema de dos osciladores armónicos desacoplados; el asociado al movimiento relativo está perturbado por el potencial gaussiano.

Cuando el potencial de interacción es pequeño y puede tratársele como una perturbación, el sistema se reduce a dos osciladores desacoplados, de la misma frecuencia. Este último hecho introduce degeneración, pues aunque los osciladores son diferentes (de masas M y m), sus frecuencias son iguales y sus energías propias, que dependen sólo de las últimas y no de las primeras, toman la forma

$$E_{Nn}^{(0)} = \hbar\omega\,(N+n+1)\,, \quad N,n = 0,1,2,\ldots, \tag{XIV.299}$$

expresión que depende sólo del número cuántico total $N+n$. Aunque la perturbación afecta sólo al oscilador x, la degeneración se manifiesta en los resultados y es necesario tomarla en cuenta.

En el caso opuesto, que ocurre cuando la frecuencia ω es lo suficientemente pequeña como para que el potencial gaussiano sea dominante, el hamiltoniano del sistema lo escribimos como

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}',$$

con

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{1}{2}M\omega^2X^2 + V_0e^{-x^2/a^2} \tag{XIV.300}$$

y

$$\hat{H}' = \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2. \tag{XIV.301}$$

El CM sigue siendo un oscilador, aunque si se insiste en despreciar ω quedaría representado por un movimiento libre. En todo caso, las energías de los dos movimientos en x y X son suficientemente distintas como para que no haya degeneración y sea posible separar la ecuación de Schrödinger en dos, factorizando la función de onda en la forma $\Psi^{(0)} = \Phi(R)\phi(x)$ y separando la energía total en $E = E_{\rm CM} + E_{\rm r}$, procedimiento que conduce a las ecuaciones

$$E_{\rm CM}\Phi(R) = \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \tfrac{1}{2}M\omega^2X^2\right)\Phi(R), \tag{XIV.302}$$

$$E_{\rm r}\phi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0e^{-x^2/a^2}\right]\phi(x). \tag{XIV.303}$$

Esta última ecuación es la que resultará perturbada por $\hat{H}'$; el CM no se ve afectado en este caso.

b) *Discusión cuantitativa parcial.*

En el primer caso discutido arriba se tiene un sistema degenerado de dos osciladores independientes, que resultan acoplados por la perturbación; el problema es enteramente similar al discutido en los problemas XIV.14–XIV.17 (y en la sección 14.4 del texto), y no es necesario repetir detalles aquí. Basta señalar que los elementos de matriz de interés del potencial de perturbación son (el primer ket en $|n_i\rangle = |i-1\rangle\,|n-i+1\rangle$ se refiere al CM y el segundo al movimiento relativo, donde la notación es la del problema XIV.14):

$$\begin{aligned}\left\langle n_i \mid V_0e^{-x^2/a^2} \mid n_j\right\rangle &= V_0\,\langle i-1 \mid j-1\rangle\left\langle n-i+1 \mid e^{-x^2/a^2} \mid n-j+1\right\rangle \\ &= V_0\delta_{ij}\left\langle n-i+1 \mid e^{-x^2/a^2} \mid n-j+1\right\rangle \\ &= V_0\left\langle n-i+1 \mid e^{-x^2/a^2} \mid n-i+1\right\rangle\delta_{ij}. \end{aligned}\tag{XIV.304}$$

Como estos elementos de matriz corresponden a V_{ii}, el determinante de la ecuación secular sólo contiene elementos distintos de cero en la diagonal principal, lo que simplifica considerablemente el cálculo. Específicamente, para un estado con grado de degeneración g existen precisamente g valores de corrección a la energía a primer orden, dados cada uno por el correspondiente valor de V_{ii}, $i = 1, 2, \ldots g$. Como ejemplo se resolverá para el estado base y el primer estado excitado.

El estado base del sistema no perturbado ($n_1 = n_2 = 0$) es no degenerado, por lo que la corrección a la energía a primer orden es

$$\delta E_{00}^{(1)} = V_0 \left\langle 0 \mid e^{-x^2/a^2} \mid 0 \right\rangle = V_0 \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-x^2 \left(\frac{m\omega a^2 + \hbar}{\hbar a^2} \right) \right] dx,$$

es decir,

$$\delta E_{00}^{(1)} = V_0 \left(\frac{1}{1+\beta} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \beta = \frac{\hbar}{m\omega a^2}. \tag{XIV.305}$$

Al primer nivel excitado corresponden dos estados no perturbados, $|1\rangle |0\rangle$ y $|0\rangle |1\rangle$, lo que genera dos correcciones a la energía; una es $V_0 \left\langle 0 \mid e^{-x^2/a^2} \mid 0 \right\rangle$, la misma que (XIV.305), mientras que la otra es

$$\begin{aligned} \delta E_{01}^{(1)} &= V_0 \left\langle 1 \mid e^{-x^2/a^2} \mid 1 \right\rangle \\ &= V_0 \frac{4m\omega}{\hbar} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-x^2 \left(\frac{m\omega a^2 + \hbar}{\hbar a^2} \right) \right] x^2 dx, \\ &= 4V_0 \left(\frac{1}{1+\beta} \right)^{\frac{3}{2}}. \end{aligned} \tag{XIV.306}$$

XIV.21 Demuestre que para ψ arbitraria y potencial de perturbación hermitiano (y en consecuencia δE real) la ecuación (T14.21) debe escribirse en general en la forma

$$\delta E = \left\langle \hat{H}' \right\rangle - \frac{\hbar^2}{4m} \left\langle \left(\frac{\nabla G}{G} \right)^2 + \left(\frac{\nabla G^*}{G^*} \right)^2 \right\rangle + \frac{i\hbar}{2} \int \mathbf{j} \cdot \left(\frac{\nabla G}{G} - \frac{\nabla G^*}{G^*} \right) dx.$$

Use esta expresión para generalizar el resultado enunciado en el texto para ψ arbitraria.

Consideremos un sistema perturbado con hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \tag{XIV.307}$$

con

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}_0 \tag{XIV.308}$$

y $\hat{H}'$ la perturbación. La solución de la ecuación de Schrödinger

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{H}' \right) \Psi = E\Psi \tag{XIV.309}$$

se escribe en la forma

$$\Psi = \psi G, \tag{XIV.310}$$

con $\psi \equiv \Psi^{(0)}$ solución del problema no perturbado. Se puede verificar inmediatamente que (XIV.309) se transforma en

$$\delta E \psi = \hat{H}' \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\nabla^2 G}{G} \psi + 2 \left(\frac{\nabla G}{G} \right) \cdot \nabla \psi \right]. \tag{XIV.311}$$

Esta expresión se puede poner en la forma de una ecuación para G, dada la solución no perturbada ψ, de manera similar a como se procedió con el operador $\hat{F}$ en la subsección 14.5.1 del texto y en el problema XIV.9. Resulta

$$\nabla^2 G + 2\frac{\nabla\psi}{\psi}\cdot\nabla G - \frac{2m}{\hbar^2}\left(\hat{H}' - \delta E\right) G = 0. \tag{XIV.312}$$

Multiplicando (XIV.311) por ψ^* e integrando sobre todo el espacio, queda

$$\delta E = \left\langle \hat{H}' \right\rangle - \frac{\hbar^2}{2m}\int \left[\psi^* \frac{\nabla^2 G}{G}\psi + 2\psi^* \left(\frac{\nabla G}{G}\right)\cdot\nabla\psi\right] dx, \tag{XIV.313}$$

donde el valor esperado $\left\langle \hat{H}' \right\rangle$ se toma sobre estados no perturbados. De una integración por partes sigue que

$$\int \psi^* \left(\frac{\nabla G}{G}\right)\cdot\nabla\psi\, dx = -\int \left[\psi\left(\frac{\nabla G}{G}\right)\cdot\nabla\psi^* + \psi^*\frac{\nabla^2 G}{G}\psi - \psi^*\left(\frac{\nabla G}{G}\right)^2\psi\right] dx, \tag{XIV.314}$$

de donde

$$\begin{aligned}\int &\left[\psi^*\frac{\nabla^2 G}{G}\psi + 2\psi^*\left(\frac{\nabla G}{G}\right)\cdot\nabla\psi\right] dx \\ &= \int \left[-\psi^*\frac{\nabla^2 G}{G}\psi - 2\psi\left(\frac{\nabla G}{G}\right)\cdot\nabla\psi^* + 2\psi^*\left(\frac{\nabla G}{G}\right)^2\psi\right] dx.\end{aligned} \tag{XIV.315}$$

Como

$$\psi^*\frac{\nabla^2 G}{G}\psi = \psi^*\frac{\nabla\cdot(\psi\nabla G)}{G} - \psi^*\frac{\nabla G}{G}\cdot\nabla\psi,$$

se puede escribir

$$\begin{aligned}\int &\left[\psi^*\frac{\nabla^2 G}{G}\psi + 2\psi^*\left(\frac{\nabla G}{G}\right)\cdot\nabla\psi\right] dx \\ &= \int \left[-\psi^*\frac{\nabla\cdot(\psi\nabla G)}{G} + \psi^*\frac{\nabla G}{G}\cdot\nabla\psi - 2\psi\left(\frac{\nabla G}{G}\right)\cdot\nabla\psi^* + 2\psi^*\left(\frac{\nabla G}{G}\right)^2\psi\right] dx \\ &= \int \left[-\frac{\nabla\cdot(\psi^*\nabla G\psi)}{G} + \psi^*\frac{\nabla G}{G}\cdot\nabla\psi - \psi\left(\frac{\nabla G}{G}\right)\cdot\nabla\psi^* + 2\psi^*\left(\frac{\nabla G}{G}\right)^2\psi\right] dx \\ &= \int \left[-\nabla\cdot\left(\frac{\psi^*\nabla G\psi}{G}\right) + \nabla\left(\frac{1}{G}\right)\cdot\psi^*\nabla G\psi \right. \\ &\qquad \left. - \psi\left(\frac{\nabla G}{G}\right)\cdot\nabla\psi^* + \psi^*\frac{\nabla G}{G}\cdot\nabla\psi + 2\psi^*\left(\frac{\nabla G}{G}\right)^2\psi\right] dx.\end{aligned}$$

Sigue así

$$\delta E = \left\langle \hat{H}' \right\rangle - \frac{\hbar^2}{2m}\int \left[\psi^*\left(\frac{\nabla G}{G}\right)^2\psi - \left(\frac{\nabla G}{G}\right)\cdot(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)\right] dx. \tag{XIV.316}$$

Como el hamiltoniano de perturbación es hermitiano y δE real, el complejo conjugado de la expresión anterior es

$$\delta E = \left\langle \hat{H}' \right\rangle - \frac{\hbar^2}{2m}\int \left[\psi\left(\frac{\nabla G^*}{G^*}\right)^2\psi^* - \left(\frac{\nabla G^*}{G^*}\right)\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)\right] dx\,. \tag{XIV.317}$$

Sumando ambas expresiones se obtiene

$$\begin{aligned}\delta E &= \left\langle \hat{H}' \right\rangle - \frac{\hbar^2}{4m} \int \psi^* \left[\left(\frac{\nabla G}{G} \right)^2 + \left(\frac{\nabla G^*}{G^*} \right)^2 \right] \psi \, dx \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{4m} \int \left[\left(\frac{\nabla G}{G} \right) - \left(\frac{\nabla G^*}{G^*} \right) \right] \cdot \left[\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi \right] \, dx. \quad \text{(XIV.318)}\end{aligned}$$

Identificando la densidad de corriente no perturbada

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi \right)$$

obtenemos finalmente que la corrección a la energía (a todo orden) puede escribirse como:

$$\delta E = \left\langle \hat{H}' \right\rangle - \frac{\hbar^2}{4m} \left\langle \left(\frac{\nabla G}{G} \right)^2 + \left(\frac{\nabla G^*}{G^*} \right)^2 \right\rangle + \frac{i\hbar}{2} \int \mathbf{j} \cdot \left(\frac{\nabla G}{G} - \frac{\nabla G^*}{G^*} \right) dx, \quad \text{(XIV.319)}$$

en donde G es solución de (XIV.312). El resultado es interesante, en cuanto que muestra la presencia de una corrección a la energía del estado debida al cambio generado por la perturbación en la distribución espacial de las partículas, más otra contribución asociada a los efectos de la perturbación sobre el flujo de las partículas.

Los términos en (XIV.319) que dependen de G corresponden a las correcciones de orden superior al primero (este último dado por el término $\left\langle \hat{H}' \right\rangle$), y dan una contribución negativa para G real. Esto significa que para todos los estados (degenerados o no) con función de onda real, el término de primer orden $\left\langle \hat{H}' \right\rangle$ representa una corrección en exceso a la energía no perturbada. Esta conclusión se aplica frecuentemente a los estados s, y, más en particular, al estado base atómico.

XIV.2. Problemas adicionales

XIV.22 Considere un sistema que puede ser descrito por un hamiltoniano que posee sólo dos estados, φ_1 y φ_2. Determine los posibles valores de la energía en términos de los elementos de matriz del hamiltoniano y compare estos resultados con los que se derivan de la teoría de perturbaciones.

Este es un ejercicio muy interesante, en tanto que permite apreciar con claridad el origen de las fórmulas proporcionadas por la teoría de perturbaciones, aunque sea en su versión más simple. Puesto que el sistema posee sólo dos estados propios, su estado más general se puede expresar en la forma (tomaremos c_1, c_2 reales)

$$\psi = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2 \quad \text{(XIV.320)}$$

y la ecuación estacionaria de Schrödinger toma la forma

$$E(c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2) = \hat{H}(c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2). \quad \text{(XIV.321)}$$

Multiplicando por φ_1^* e integrando, y haciendo después lo propio con φ_2^*, se obtiene el siguiente sistema homogéneo de ecuaciones (φ_1, φ_2 constituyen una base ortonormal completa y $H_{21} = H_{12}^*$):

$$c_1 (H_{11} - E) + c_2 H_{12} = 0, \quad c_1 H_{21} + c_2 (H_{22} - E) = 0. \tag{XIV.322}$$

El determinante de este sistema deberá anularse para garantizar la existencia de soluciones no triviales. Luego debe cumplirse que

$$(H_{11} - E)(H_{22} - E) - H_{12}^2 = 0. \tag{XIV.323}$$

Los dos valores posibles de la energía son las raíces de esta ecuación, es decir,

$$\begin{aligned} E &= \tfrac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \sqrt{\tfrac{1}{4}(H_{11} + H_{22})^2 + (H_{12}^2 - H_{11}H_{22})}, \\ E &= \tfrac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \sqrt{\tfrac{1}{4}(H_{22} - H_{11})^2 + H_{12}^2}. \end{aligned} \tag{XIV.324}$$

Conviene analizar dos casos. El primero ocurre cuando $H_{22} \neq H_{11}$; en este caso se puede escribir

$$E = \tfrac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \tfrac{1}{2}(H_{22} - H_{11}) \sqrt{1 + \left(\frac{2H_{12}}{H_{22} - H_{11}}\right)^2}, \tag{XIV.325}$$

por lo que, suponiendo que se cumple que

$$\left|\frac{2H_{12}}{H_{22} - H_{11}}\right| < 1, \tag{XIV.326}$$

se puede hacer el siguiente desarrollo:

$$E = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \frac{H_{22} - H_{11}}{2} \left[1 + 2\left(\frac{H_{12}}{H_{22} - H_{11}}\right)^2 - 2\left(\frac{H_{12}}{H_{22} - H_{11}}\right)^4 + \ldots\right]. \tag{XIV.327}$$

Separando las dos soluciones, se obtienen las energías

$$E_1 = E_- = H_{11} - \frac{H_{12}^2}{H_{22} - H_{11}} + \frac{H_{12}^4}{(H_{22} - H_{11})^3} - \ldots, \tag{XIV.328}$$

$$E_2 = E_+ = H_{22} + \frac{H_{12}^2}{H_{22} - H_{11}} - \frac{H_{12}^4}{(H_{22} - H_{11})^3} + \ldots \tag{XIV.329}$$

Cuando $H_{22} = H_{11}$ el desarrollo anterior no es válido, pero de (XIV.324) sigue de inmediato que

$$E_\pm = H_0 \pm H_{12}, \quad H_0 = H_{11} = H_{22}. \tag{XIV.330}$$

Un tratamiento similar puede hacerse extensivo al caso en que la diferencia $H_{22} - H_{11}$ es muy pequeña, pero no nula (caso no degenerado, pero con niveles muy cercanos).

Con el objeto de hacer contacto con la teoría de perturbaciones, supongamos ahora que el hamiltoniano tiene la forma $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$ y que $\hat{H}'$ puede considerarse como una perturbación de $\hat{H}^0$. En este caso debemos tomar a las φ_i como funciones propias de $\hat{H}^0$, por lo que

$$H_{11}^0 = E_1^{(0)}, \quad H_{22}^0 = E_2^{(0)}, \tag{XIV.331}$$

$$H_{11} = H_{11}^0 + H_{11}' = E_1^{(0)} + H_{11}', \quad H_{12} = H_{12}', \tag{XIV.332}$$

etc., y $\psi_i^{(0)} = \varphi_i, i = 1, 2$. Cuando $E_1^{(0)} \neq E_2^{(0)}$, se pueden usar las ecuaciones (XIV.328) y (XIV.329), que dan ahora

$$E_1 = E_1^{(0)} + H'_{11} - \frac{H'^2_{12}}{H_{22} - H_{11}} + \frac{H'^4_{12}}{(H_{22} - H_{11})^3} - \ldots, \qquad \text{(XIV.333)}$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + H'_{22} + \frac{H'^2_{12}}{H_{22} - H_{11}} - \frac{H'^4_{12}}{(H_{22} - H_{11})^3} + \ldots \qquad \text{(XIV.334)}$$

En estas expresiones se puede sustituir $H_{22} - H_{11}$ por $E_2^{(0)} - E_1^{(0)}$ sin cometer un error grave, lo que conduce a las fórmulas de la teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger para sistemas no degenerados (escritas explícitamente aquí a tercer orden, inclusive).

En caso de existir degeneración en el sistema no perturbado, se cumple que $E_2^{(0)} = E_1^{(0)} = E^{(0)}$, por lo que (XIV.326) deja de aplicarse y debemos recurrir directamente a (XIV.324) o a (XIV.330), lo que da

$$E_\pm = E^{(0)} + H'_{11} \pm H'_{12} + \ldots, \qquad \text{(XIV.335)}$$

que es el resultado de la teoría de perturbaciones para estados degenerados. Las ecuaciones (XIV.333)-(XIV.335) muestran que el efecto del acoplamiento entre los dos estados debido al término H'_{12} depende de manera importante de la distancia entre los dos niveles: cuando están muy separados la corrección es de segundo orden, pero es de primer orden cuando los niveles se acercan o coinciden.

Como complemento a esta discusión, véanse los ejercicios XIV.39 y XIV.43.

XIV.23 Considere un átomo hidrogenoide con carga nuclear Ze en su estado base. Determine el cambio que ocurre en su energía si la carga del núcleo aumenta repentinamente en la unidad ($Z \to Z+1$), como sucedería, por ejemplo, al producirse un decaimiento β nuclear. Use la teoría de perturbaciones a primer orden y compare con el resultado exacto.

El hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}',$$

donde $\hat{H}_0$ es el hamiltoniano del átomo hidrogenoide con Z protones y

$$\hat{H}' = -\frac{e^2}{r} \qquad \text{(XIV.336)}$$

representa la perturbación debida al cambio repentino de la carga nuclear. La corrección a la energía del estado base, que es un estado no degenerado, está dada por

$$\delta E_1^{(1)} = \left\langle 100 \mid \hat{H}' \mid 100 \right\rangle = -4 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 e^2 \int_0^\infty r e^{-2Zr/a_0} dr,$$

es decir,

$$\delta E_1^{(1)} = -\frac{m_0 e^4}{\hbar^2} Z. \qquad \text{(XIV.337)}$$

Por otro lado, el valor propio de la energía de un átomo hidrogenoide en su estado base es

$$E_{1s}^{(0)}(Z) = -\frac{m_0 e^4}{2\hbar^2} Z^2, \qquad \text{(XIV.338)}$$

por lo que la corrección exacta (y, por lo tanto, a todo orden de la teoría de perturbaciones) debida al cambio de la carga nuclear es

$$E_{1s}^{(0)}\left(Z+1\right)-E_{1s}^{(0)}\left(Z\right)=-\frac{m_0e^4}{\hbar^2}\left(Z+\tfrac{1}{2}\right). \tag{XIV.339}$$

Comparando con (XIV.337) vemos que el cálculo a primer orden es una mala aproximación para Z del orden de la unidad, pero mejora considerablemente conforme Z crece.

XIV.24 Un electrón atómico se mueve en el potencial

$$V=-\frac{e^2}{r}+\alpha\left(x^2+y^2\right)+\beta z^2,$$

con $0<\alpha<-\beta\ll e^2/a_0^3$. Determine la corrección a la energía de los primeros cinco eigenestados orbitales, sin considerar el espín del electrón. Calcule el efecto Zeeman para $\mathbf{B}$ paralelo al eje Oz y para $\mathbf{B}$ paralelo al eje Ox.

En coordenadas esféricas el potencial se escribe en la forma

$$\begin{aligned}V &= -\frac{e^2}{r}+\alpha\left(x^2+y^2\right)+\beta z^2\\ &= -\frac{e^2}{r}+r^2\left(\alpha\,\mathrm{sen}^2\,\theta+\beta\cos^2\theta\right)\\ &= -\frac{e^2}{r}+r^2\left(\alpha+\left(\beta-\alpha\right)\cos^2\theta\right),\end{aligned} \tag{XIV.340}$$

que es la suma de una interacción coulombiana y un término armónico; la condición $0<\alpha<-\beta\ll e^2/a_0^3$ permite considerar al término armónico como una perturbación. De esta manera, el hamiltoniano del sistema puede ser escrito como

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}',$$

con $\hat{H}_0$ el hamiltoniano del átomo de hidrógeno y

$$\hat{H}'=r^2\left(\alpha+\left(\beta-\alpha\right)\cos^2\theta\right) \tag{XIV.341}$$

una perturbación.

Los elementos de matriz de la perturbación tienen la forma

$$\begin{aligned}&\left\langle nlm\mid\hat{H}'\mid n'l'm'\right\rangle\\ &\quad=\int R_{nl}(r)R_{n'l'}(r)\,r^4\,dr\int Y_l^{m*}\left(\theta,\varphi\right)\left[\alpha+\left(\beta-\alpha\right)\cos^2\theta\right]Y_{l'}^{m'}\left(\theta,\varphi\right)\,d\Omega.\end{aligned} \tag{XIV.342}$$

De la teoría de los armónicos esféricos se puede escribir la relación de recurrencia

$$\begin{aligned}\cos^2\theta\,Y_l^m\left(\theta,\varphi\right) &= \frac{1}{2l+3}\left[\frac{\left(\left(l+1\right)^2-m^2\right)\left(\left(l+2\right)^2-m^2\right)}{\left(2l+1\right)\left(2l+5\right)}\right]^{1/2}Y_{l+2}^m\left(\theta,\varphi\right)\\ &\quad+\left[\frac{\left(l+1\right)^2-m^2}{\left(2l+1\right)\left(2l+3\right)}+\frac{l^2-m^2}{4l^2-1}\right]Y_l^m\left(\theta,\varphi\right)\\ &\quad+\frac{1}{2l+1}\left[\frac{\left[\left(l+1\right)^2-m^2\right]\left(l^2-m^2\right)}{\left(2l-1\right)\left(2l-3\right)}\right]^{1/2}Y_{l-2}^m\left(\theta,\varphi\right),\end{aligned} \tag{XIV.343}$$

la que, en combinación con la propiedad de ortonormalidad,

$$\int Y_l^{m*}(\theta,\varphi)\, Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)\, d\Omega = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'},$$

conduce a

$$\begin{aligned}\int Y_l^{m*}(\theta,\varphi)\left[\alpha+(\beta-\alpha)\cos^2\theta\right] Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)\, d\Omega &= \alpha\delta_{l,l'}\delta_{m,m'} \\ &+(\beta-\alpha)\left\{\frac{1}{2l'+3}\left[\frac{\left((l'+1)^2-m'^2\right)\left((l'+2)^2-m'^2\right)}{(2l'+1)(2l'+5)}\right]^{1/2}\delta_{l,l'+2}\right. \\ &+\left[\frac{(l'+1)^2-m'^2}{(2l'+1)(2l'+3)}+\frac{l'^2-m'^2}{4l'^2-1}\right]\delta_{l,l'} \\ &\left.+\frac{1}{2l'+1}\left[\frac{\left((l'+1)^2-m'^2\right)\left(l'^2-m'^2\right)}{(2l'-1)(2l'-3)}\right]^{1/2}\delta_{l,l'-2}\right\}\delta_{m,m'}.\end{aligned} \tag{XIV.344}$$

Vemos que los únicos elementos de matriz diferentes de cero son los que conectan estados con el mismo número cuántico magnético y con $\Delta l = 0, \pm 2$. Las funciones de onda de los primeros cinco estados orbitales del átomo de hidrógeno son

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \tag{XIV.345}$$

$$\psi_{200} = \psi_a = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^3}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}, \tag{XIV.346}$$

$$\psi_{2,1,-1} = \psi_b = \frac{1}{\sqrt{64\pi a_0^3}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\operatorname{sen}\theta e^{-i\varphi}, \tag{XIV.347}$$

$$\psi_{210} = \psi_c = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^3}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\cos\theta, \tag{XIV.348}$$

$$\psi_{211} = \psi_d = \frac{1}{\sqrt{64\pi a_0^3}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\operatorname{sen}\theta e^{i\varphi}. \tag{XIV.349}$$

Los elementos de matriz que no se anulan están todos sobre la diagonal principal, y son $\hat{H}'_{00}$, $\hat{H}'_{aa}$, $\hat{H}'_{bb}$, $\hat{H}'_{cc}$, $\hat{H}'_{dd}$. El cálculo explícito del primero de estos elementos es como sigue:

$$\begin{aligned}\hat{H}'_{00} &= \left\langle 100 \mid \hat{H}' \mid 100\right\rangle \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^\infty e^{-2r/a_0}r^4 dr \int\left[\alpha+(\beta-\alpha)\cos^2\theta\right]\operatorname{sen}\theta\, d\theta\, d\varphi \\ &= 2a_0^2\int_0^\infty e^{-2x}x^4 dx\int\left[\alpha+(\beta-\alpha)\cos^2\theta\right]\operatorname{sen}\theta\, d\theta\, d\varphi \\ &= a_0^2(2\alpha+\beta).\end{aligned} \tag{XIV.350}$$

De manera análoga se obtiene

$$\hat{H}'_{aa} = \left\langle 200 \mid \hat{H}' \mid 200\right\rangle = 14a_0^2(2\alpha+\beta), \tag{XIV.351}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}'_{bb} &= \hat{H}'_{dd} = \left\langle 211 \mid \hat{H}' \mid 211 \right\rangle \\ &= \left\langle 21-1 \mid \hat{H}' \mid 21-1 \right\rangle = 6a_0^2(4\alpha+\beta), \qquad \text{(XIV.352)} \\ \hat{H}'_{cc} &= \left\langle 210 \mid \hat{H}' \mid 210 \right\rangle = 6a_0^2(2\alpha+3\beta). \qquad \text{(XIV.353)}\end{aligned}$$

El estado base del átomo de hidrógeno es no degenerado, y la corrección a su energía está dada directamente por

$$\delta E_1^{(1)} = \hat{H}'_{00} = a_0^2\,(2\alpha+\beta)\,. \qquad \text{(XIV.354)}$$

Para el primer estado excitado, cuya degeneración es de grado 4, las correcciones a la energía se obtienen resolviendo la correspondiente ecuación secular, que toma la forma

$$\begin{vmatrix} \hat{H}'_{aa}-\delta E_2^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{H}'_{bb}-\delta E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{H}'_{cc}-\delta E_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{H}'_{dd}-\delta E_2^{(1)} \end{vmatrix} = 0. \qquad \text{(XIV.355)}$$

Las raíces de esta ecuación son

$$\delta E_1^{(1)} = 14a_0^2\,(2\alpha+\beta)\,, \quad 6a_0^2\,(4\alpha+\beta)\,, \quad 6a_0^2\,(2\alpha+3\beta)\,; \qquad \text{(XIV.356)}$$

la primera y última son simples, pero doble la segunda. En otras palabras, la degeneración se rompe para los niveles con $m=0$, pero no para los niveles b y d, que corresponden a $m \neq 0$.

La aplicación de un campo magnético externo, orientado a lo largo del eje Oz, rompe la degeneración subsistente entre los niveles con $m=1$ y $m=-1$, pues su energía se desplaza por la cantidad

$$E_{\text{mag}} = \frac{eB\hbar}{2m_0c}m. \qquad \text{(XIV.357)}$$

Sin embargo, si B es paralelo al eje Ox, la corrección Zeeman (lineal) a la energía queda dada por la expresión

$$E_{\text{mag}} = \frac{eB\hbar}{2m_0c}\left\langle \hat{L}_x \right\rangle, \qquad \text{(XIV.358)}$$

la que se anula para los estados hidrogenoides con $n=1$ y $n=2$, por lo que en este caso subsiste la degeneración entre los niveles Stark b y d.

* **XIV.25** Determine la energía del estado base de un átomo de hidrógeno colocado dentro de un campo eléctrico uniforme y constante. Haga el cálculo hasta quinto orden de la teoría de perturbaciones, inclusive.

Ocasionalmente se hace posible desarrollar métodos de aproximación específicos para resolver con mayor eficiencia un cierto problema. El presente ejercicio ofrece un ejemplo de este tipo de posibilidades aplicado al efecto Stark del estado base del hidrógeno.

La función de onda del estado base del hidrógeno y su energía son $\psi_{100} = (\pi a_0^3)^{-1/2}\ e^{-r/r_0}$, $E_0 = -m_0 e^4/2\hbar^2$, con $a_0 = \hbar^2/m_0 e^2$. La descripción se simplifica considerablemente pasando a unidades atómicas, $m_0 = e_0 = \hbar = 1 \to a_0 = 1$, en las que se obtiene

$$\psi_0 \equiv \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}, \quad E_0 = -\frac{1}{2}. \tag{XIV.359}$$

Colocando el eje Oz sobre la dirección del campo, la ecuación de Schrödinger es (en ua)

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r} + \mathcal{E}z\right)\psi = E\psi. \tag{XIV.360}$$

Para hacer el desarrollo perturbativo escribimos (el índice se refiere al orden de la corrección)

$$E = E_0 + e_1 + e_2 + \ldots; \quad \psi = \psi_0 + \varphi_1 + \varphi_2 + \ldots \tag{XIV.361}$$

Como el potencial de perturbación es una función impar, sigue de inmediato que

$$e_1 = \langle 0|\, \hat{H}'\, |0\rangle = 0. \tag{XIV.362}$$

De hecho, esta consideración se puede hacer extensiva a todas las correcciones impares de la energía, por lo que resulta

$$E = E_0 + e_2 + e_4 + \ldots \tag{XIV.363}$$

Sustituyendo en (XIV.360) y separando la ecuación resultante por órdenes, se obtiene

$$\left(\hat{H}_0 - E_0\right)\varphi_1 = -\hat{H}'\psi_0, \tag{XIV.364}$$

$$\left(\hat{H}_0 - E_0\right)\varphi_2 = -\hat{H}'\varphi_1 - e_2\psi_0, \tag{XIV.365}$$

$$\vdots$$

donde $\hat{H}_0 = -\frac{1}{2}\nabla^2 - 1/r$ y $\hat{H}' = \mathcal{E}z$.

Para resolver (XIV.364) utilizamos coordenadas esféricas, con lo que se obtiene

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\varphi_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\varphi_1}{\partial r}\right) - \frac{1}{2r^2\,\mathrm{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\,\mathrm{sen}\,\theta\frac{\partial\varphi_1}{\partial\theta} + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{r}\right)\varphi_1 &= -\frac{\mathcal{E}}{\sqrt{\pi}} z e^{-r} \\ &= -\frac{\mathcal{E}}{\sqrt{\pi}} r e^{-r}\cos\theta. \end{aligned} \tag{XIV.366}$$

Una inspección de esta ecuación revela que las variables se separan con la sustitución $\varphi_1 = g(r) + f(r)\cos\theta$, con $g(r)$ solución de la ecuación homogénea. De esta manera se obtiene

$$-\frac{1}{2}\left(f'' + \frac{2}{r}f'\right) + \frac{1}{r^2}f + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{r}\right)f = -\frac{\mathcal{E}}{\sqrt{\pi}} r e^{-r}, \tag{XIV.367}$$

$$-\frac{1}{2}\left(g'' + \frac{2}{r}g\right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{r}\right)g = 0. \tag{XIV.368}$$

No es complicado encontrar una solución particular de la primera de estas ecuaciones y la solución de cuadrado integrable de la segunda. Se obtiene

$$f = -\frac{\mathcal{E}}{2\sqrt{\pi}} r\,(2+r)\,e^{-r}, \quad g = Ae^{-r}. \tag{XIV.369}$$

El valor específico $E_0 = -1/2$ del eigenvalor resulta determinante para la obtención de esta solución, lo que muestra la particularidad del método seguido. La constante A la podemos fijar imponiendo la condición de que φ_1 sea ortogonal a ψ_0 (cf. la primera de las ecuaciones (T14.12)); esto da $A = 0$, por lo que finalmente se obtiene

$$\varphi_1 = -\frac{\mathcal{E}}{2\sqrt{\pi}} z\,(2+r)\,e^{-r}. \tag{XIV.370}$$

La corrección a la energía a segundo orden la obtenemos notando que

$$\begin{aligned} E\,(\langle\psi_0| + \langle\varphi_1| + \ldots)\,(|\psi_0\rangle + |\varphi_1\rangle + \ldots) & \\ &= E\,(1 + \langle\varphi_1\,|\varphi_1\rangle + \ldots) = (E_0 + E_2)\,(1 + \langle\varphi_1\,|\varphi_1\rangle + \ldots) \\ &= (\langle\psi_0| + \langle\varphi_1| + \ldots)\left(\hat{H}_0 + \hat{H}'\right)(|\psi_0\rangle + |\varphi_1\rangle + \ldots) \\ &= E_0 + \langle\psi_0|\,\hat{H}'\,|\varphi_1\rangle + \langle\varphi_1|\,\hat{H}_0\,|\varphi_1\rangle + \langle\varphi_1|\,\hat{H}'\,|\psi_0\rangle + \ldots \end{aligned} \tag{XIV.371}$$

Como de (XIV.364) sigue

$$\langle\varphi_1|\,\hat{H}_0\,|\varphi_1\rangle = E_0\,\langle\varphi_1\,|\varphi_1\rangle - \langle\varphi_1|\,\hat{H}'\,|\psi_0\rangle\,,$$

queda

$$(E_0 + E_2)\,(1 + \langle\varphi_1\,|\varphi_1\rangle + \ldots) = E_0\,(1 + \langle\varphi_1\,|\varphi_1\rangle) + \langle\psi_0|\,\hat{H}'\,|\varphi_1\rangle + \ldots, \tag{XIV.372}$$

de donde sigue, hasta segundo orden,

$$E_2 = \langle\psi_0|\,\hat{H}'\,|\varphi_1\rangle\,. \tag{XIV.373}$$

Efectuando los cálculos requeridos se obtiene

$$E_2 = -\frac{\mathcal{E}^2}{2\pi} 2\pi \int_{-\pi}^{\pi} \cos^2\theta d\,(\cos\theta) \int_0^{\infty} r^4(2+r)e^{-2r}dr = -\tfrac{9}{4}\mathcal{E}^2. \tag{XIV.374}$$

Para continuar con el proceso debe resolverse ahora la ecuación (XIV.365); se obtiene para la siguiente corrección (no sin una buena dosis de labor)

$$\varphi_2 = -\mathcal{E}^2\left[\tfrac{81}{16} - \tfrac{7}{16}r^2 - \tfrac{1}{24}r^3 - \tfrac{1}{16}z^2\left(15 + 10r + 2r^2\right)\right]\psi_0, \tag{XIV.375}$$

$$E_4 = -\tfrac{3555}{64}\mathcal{E}^4. \tag{XIV.376}$$

Por lo tanto, la energía, exacta hasta quinto orden inclusive de la teoría de perturbaciones, es[9]

$$E = E_0 - \tfrac{9}{4}\mathcal{E}^2 - \tfrac{3555}{64}\mathcal{E}^4 + O(\mathcal{E}^6)\ \text{ua}. \tag{XIV.377}$$

[9] A. Dalgarno en *Quantum Theory*, I, D. R. Bates, editor (Academic Press, 1961).

XIV.26 Determine la corrección a primer orden a la energía del estado fundamental de un átomo de hidrógeno debida:

a) al tamaño finito del núcleo, suponiendo que la carga eléctrica del protón está distribuida según la ley

$$\rho(r) = \frac{e_0}{8\pi R^3} e^{-r/R};$$

b) a la corrección relativista a la masa del electrón.

¿Cuál de estas correcciones es más importante?

Es necesario determinar en primer lugar el potencial producido por el núcleo extenso, que está dado por la solución de la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 V(r) = 4\pi e_0 \rho(r). \tag{XIV.378}$$

Debido a la simetría esférica del problema, esta ecuación se reduce a

$$V'' + \frac{2}{r} V' = \frac{e_0}{2R^3} e^{-r/R}. \tag{XIV.379}$$

Es fácil verificar que la solución general de esta ecuación es

$$V(r) = A + \frac{B}{r} + \frac{e^2}{2R}\left(1 + \frac{2R}{r}\right) e^{-r/R}. \tag{XIV.380}$$

Lejos del núcleo extenso, el potencial debe ser el mismo que el producido por su equivalente puntual, lo que significa que debe cumplir la condición asintótica $rV(r) \to -e^2$ cuando $r \to \infty$; esto da $A = 0$, $B = -e^2$ y queda

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{2R}\left(1 + \frac{2R}{r}\right) e^{-r/R} \equiv -\frac{e^2}{r} + \hat{H}', \tag{XIV.381}$$

donde $\hat{H}'$ representa la perturbación producida por el núcleo extenso de radio R.

Como el estado base de átomo no es degenerado, la corrección a la energía resulta

$$\delta E'_{100} = \frac{e^2}{2R} \langle 100| \left(1 + \frac{2R}{r}\right) e^{-r/R} |100\rangle . \tag{XIV.382}$$

Usando unidades atómicas y la función de onda (XIV.359), queda

$$\begin{aligned} \delta E'_{100} &= \frac{2}{R} \int_0^\infty \left(1 + \frac{2R}{r}\right) r^2 e^{-2r - r/R} dr \\ &= \frac{8R^2(R+1)}{(2R+1)^3}. \end{aligned} \tag{XIV.383}$$

Como las dimensiones del núcleo son mucho menores que el radio de la primera órbita de Bohr, se cumple que $R \ll 1$, y la corrección anterior se puede aproximar como

$$\delta E'_{100} = 8R^2. \tag{XIV.384}$$

En lo que respecta a la corrección generada por la variación de la masa con la velocidad, el término perturbativo se obtiene del desarrollo de la expresión relativista para la energía[10]

$$\sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} - m_0c^2 = \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3c^2} + \ldots, \tag{XIV.385}$$

por lo que el correspondiente hamiltoniano de perturbación es

$$\hat{H}'' = -\frac{\hat{p}^4}{8m_0^3c^2}. \tag{XIV.386}$$

Como $\hat{p}^4$ conmuta con los operadores de momento angular por ser un escalar, podemos seguir usando la base estándar para obtener

$$\delta E''_{100} = -\frac{1}{8m_0^3c^2} \langle 100| \hat{p}^4 |100\rangle . \tag{XIV.387}$$

De la ecuación de Schrödinger del átomo no perturbado sigue que

$$\hat{p}^2 |nlm\rangle = \left(\frac{2}{r} - \frac{1}{n^2}\right) |nlm\rangle , \tag{XIV.388}$$

y podemos escribir[11]

$$\delta E''_{100} = -\frac{1}{8m_0^3c^2} \langle 100| \left(\frac{2}{r} - 1\right)^2 |100\rangle = -\tfrac{5}{8}\alpha^2. \tag{XIV.389}$$

Para comparar los resultados anteriores, consideramos que un núcleo tiene dimensiones del orden de 1 fermi $= 10^{-13}$ cm, mientras que el radio de Bohr es del orden de 10^{-8} cm; esto significa que debemos tomar $R/a_0 \sim 10^{-5}$. Como $\alpha \sim 10^{-2}$, obtenemos $|\delta E'_{100}/\delta E''_{100}| \sim 10^{-6}$, que muestra que, aunque las correcciones relativistas a la energía de los niveles atómicos son pequeñas en sí mismas (forman parte de la llamada *estructura fina* del espectro), las correcciones generadas por las dimensiones finitas del núcleo son despreciables aun frente a ellas (algunas de las correcciones de origen nuclear forman parte de la llamada *estructura hiperfina* del espectro; la presente es aún menor que estas últimas).

XIV.27 Como se señala en la subsección 14.6.2 del texto, en ocasiones no es posible (o conveniente) utilizar métodos perturbativos para resolver problemas complicados, por lo que se hace necesario recurrir a otro tipo de transformaciones. Un ejemplo exitoso de un procedimiento de esta naturaleza ocurre con hamiltonianos de la forma (en términos adimensionales)

$$\hat{H} = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \tfrac{1}{2} + \eta(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}), \quad |\eta| < \tfrac{1}{2},$$

que representa un oscilador perturbado por una interacción, con constante de acoplamiento η. Construya una transformación lineal que permita diagonalizar este hamiltoniano de manera exacta.

[10] Este tema se discute con detalle en la sección 15.4 del texto.

[11] La constante de estructura fina vale $\alpha = 1/c$ ua; es decir, $c = 137$ ua.

Proponemos la transformación lineal

$$\hat{a} = \alpha\hat{\lambda} + \beta\hat{\lambda}^\dagger, \quad \hat{a}^\dagger = \alpha\hat{\lambda}^\dagger + \beta\hat{\lambda}, \tag{XIV.390}$$

con α, β reales, donde $\hat{\lambda}$, $\hat{\lambda}^\dagger$ son dos nuevos operadores, de los que se demanda que cumplan la regla de conmutación usual (lo que permitirá equipararlos con operadores de creación y aniquilación)

$$\left[\hat{\lambda}, \hat{\lambda}^\dagger\right] = \mathbb{I}. \tag{XIV.391}$$

Sustituyendo (XIV.391) en (XIV.390) se obtiene la condición

$$\alpha^2 - \beta^2 = 1. \tag{XIV.392}$$

El hamiltoniano se escribe en las nuevas variables como

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \left(\alpha^2 + \beta^2 + 4\eta\alpha\beta\right)\hat{\lambda}^\dagger\hat{\lambda} + \tfrac{1}{2} + 2\eta\alpha\beta + \beta^2 \\ &\quad + \left(\eta\alpha^2 + \eta\beta^2 + \alpha\beta\right)\left(\hat{\lambda}^\dagger\hat{\lambda}^\dagger + \hat{\lambda}\hat{\lambda}\right). \end{aligned} \tag{XIV.393}$$

El último término, que no es usual, desaparece con la selección

$$\eta\alpha^2 + \eta\beta^2 + \alpha\beta = 0. \tag{XIV.394}$$

Es fácil ver que si esta condición se cumple, entonces

$$\alpha^2 + \beta^2 + 4\eta\alpha\beta = \sqrt{1 - 4\eta^2}, \tag{XIV.395}$$

$$\tfrac{1}{2} + 2\eta\alpha\beta + \beta^2 = \tfrac{1}{2}\sqrt{1 - 4\eta^2}. \tag{XIV.396}$$

Sustituyendo estos resultados en el hamiltoniano, éste se transforma en

$$\hat{H} = \sqrt{1 - 4\eta^2}\left(\hat{\lambda}^\dagger\hat{\lambda} + \tfrac{1}{2}\right), \tag{XIV.397}$$

con lo que el problema se ha reducido al de un oscilador armónico en la representación $\hat{\lambda}$. Los estados propios y las correspondientes eigenenergías son (cf. ecuación (T11.44))

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{\lambda}^\dagger\right)^n|n\rangle, \quad \hat{\lambda}\,|0\rangle = 0, \tag{XIV.398}$$

$$E_n = \sqrt{1 - 4\eta^2}\left(n + \tfrac{1}{2}\right). \tag{XIV.399}$$

La anterior es un ejemplo de la llamada *transformación canónica de Bogolyubov*, la cual tiene un gran número de aplicaciones de importancia en física cuántica. Es posible demostrar que esta transformación es unitaria, lo que justifica su nombre.

XIV.3. Ejercicios

XIV.28 Considere una partícula dentro de un pozo cuadrado tridimensional de longitud L. Encuentre las correcciones a los niveles de energía y las funciones de onda correctas del problema perturbado por la fuerza de gravedad.

XIV.29 Una partícula de masa m se coloca en un pozo unidimensional infinito de anchura a y se somete a la pertubación

$$W = a\omega_0 \delta\left(x - \frac{a}{2}\right),$$

con ω_0 una constante real con unidades de energía.

a) Calcule, a primer orden en ω_0, la corrección que W induce en los niveles de energía.

b) Resuelva el problema exactamente y compare con los resultados del inciso anterior.

XIV.30 Un rotor plano de momento de inercia I y momento dipolar eléctrico $\mathbf{d}$ se mueve en el seno de un campo eléctrico uniforme y constante $\overrightarrow{\varepsilon}$, orientado sobre el plano de rotación. Determine las correcciones a la energía de orden más bajo no nulas, considerando el efecto del campo como una perturbación. Discuta las propiedades de la polarizabilidad del dipolo, definida ésta como $\alpha = -\partial^2 \langle E \rangle / \partial \varepsilon^2$.

XIV.31 Un rotor tridimensional de momento de inercia I y momento dipolar eléctrico $\mathbf{d}$ paralelo al eje del rotor se mueve dentro de un campo eléctrico uniforme y constante $\overrightarrow{\varepsilon}$, orientado sobre el plano de rotación. Determine la corrección a la energía del estado base de orden más bajo no nula, considerando el efecto del campo como una perturbación.

XIV.32 Determine las funciones de onda correctas que corresponden al problema XIV.11.

XIV.33 Este ejercicio es una invitación a que se estudie en este momento el problema XVII.12, en el que de hecho se trata de una perturbación independiente del tiempo. Demuestre que las ecuaciones (XVII.166) y (XVII.167) describen también osciladores clásicos en reposo, a los que se les aplica repentinamente el campo eléctrico.

XIV.34 Considere un electrón dentro de un pozo rectangular infinito de ancho a, en el interior del cual se aplica un campo eléctrico uniforme y constante. Determine la energía del estado fundamental a primer orden de la teoría de perturbaciones, y una primera aproximación a la función de onda de este estado.[12]

XIV.35 Un pozo rectangular infinito de ancho a tiene un escalón rectangular en la mitad derecha de su piso, de altura h. Determine de manera aproximada la energía del estado fundamental a segundo orden y su función de onda a primer orden, cuando $h = \lambda E_1^{(0)}$, $\lambda \ll 1$.[13]

XIV.36 Dos rotores planos iguales se encuentran acoplados, de tal forma que su hamiltoniano es

$$\hat{H} = A\left(\hat{p}_{\theta_1}^2 + \hat{p}_{\theta_2}^2\right) - B\cos(\theta_1 - \theta_2), \quad A, B > 0.$$

Determine el espectro de energía del sistema y las correspondientes funciones propias a orden cero

[12] La solución exacta y referencias pueden verse en J. N. Churchill y F. O. Arntz, *Am. J. Phys.*, **37** (1969) 693.

[13] La solución exacta puede verse en L. Melander, *J. Chem. Ed.*, **49** (1972) 686.

a) hasta términos lineales en B, suponiendo que $B \ll A\hbar^2$;

b) reduciendo el problema al de un oscilador armónico, cuando $B \gg A\hbar^2$.

XIV.37 Considere un sistema con momento angular $\mathbf{J}$ descrito por el hamiltoniano

$$\hat{H}_0 = a\hat{J}_z + \frac{b}{\hbar}\hat{J}_z^2,$$

con a, $b > 0$ constantes con dimensiones de frecuencia. A continuación:

a) Determine los niveles de energía del sistema no perturbado. ¿Para qué valores de la razón b/a el sistema es degenerado?

b) Si se aplica un campo magnético $\mathbf{B}_0$ en la dirección $\mathbf{u}$ con ángulos polares θ y φ, la interacción del momento magnético del sistema, $\mathbf{M} = \gamma\mathbf{J}$, está descrita por el hamiltoniano

$$W = \omega_0 \hat{J}_u,$$

donde γ es la razón giromagnética, $\omega_0 = -\gamma\,|\mathbf{B}_0|$ es la frecuencia de Larmor en el campo $\mathbf{B}_0$ y $\hat{J}_u$ es la componente de $\hat{\mathbf{J}}$ en la dirección $\mathbf{u}$,

$$\hat{J}_u = \hat{J}_z \cos\theta + \hat{J}_x \operatorname{sen}\theta \cos\varphi + \hat{J}_y \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\varphi.$$

Escriba la matriz que representa a W en la base de los eigenestados de $\hat{H}_0$.

c) Suponga que $b = a$, que $\mathbf{u}$ está orientado a lo largo del eje Ox y que $\omega_0 \ll a$, y determine las energías y eigenestados del sistema a primer orden en ω_0.

d) Suponga que $b = 2a$ y que $\omega_0 \ll a$, con $\mathbf{u}$ en dirección arbitraria. Use la base $\{|+\rangle, |0\rangle, |-\rangle\}$ para obtener una expresión para el estado base del hamiltoniano perturbado, a primer orden en ω_0. Calcule $\langle\mathbf{M}\rangle$ en el estado base. ¿Son $\mathbf{M}$ y $\mathbf{B}_0$ paralelos? Demuestre que se puede escribir

$$\langle M_i \rangle = \sum_i \chi_{ij} B_j,$$

con $i, j = x, y, z$. Calcule las componentes χ_{ij} del tensor de susceptibilidad.

XIV.38 El fondo inicialmente plano de un pozo rectangular infinito de ancho a se sustituye con uno curvo de la forma $V'(x) = \eta \operatorname{sen}(\pi x/a)$. Determine a primer orden en η el efecto de este cambio sobre los valores propios de la energía.

XIV.39 La matriz hamiltoniana de un sistema tiene la forma (c es una constante)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & c & 0 \\ c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}.$$

Determine sus valores propios de manera exacta y usando teoría de perturbaciones hasta segundo orden, inclusive. Estudie la correspondencia entre los resultados de ambos métodos.

XIV.40 Un electrón se encuentra confinado en una caja cúbica de lado a, la cual se extiende sobre cada eje desde $-a/2$ hasta $+a/2$. El estado del electrón corresponde a $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 6$. Se aplica un campo eléctrico débil:

a) con $H' = e\mathcal{E}z$;

b) con $H' = \beta e\mathcal{E}xy$.

Determine la energía del electrón a primer orden de la teoría de perturbaciones en ambos casos.

XIV.41 El hamiltoniano de un rotor rígido sujeto a la acción de un campo magnético perpendicular al eje Ox tiene la forma general $A\hat{\mathbf{L}}^2 + B\hat{L}_z + C\hat{L}_y$. Obtenga las correspondientes funciones y valores propios exactos, y considere después el problema a segundo orden de la teoría de perturbaciones para el caso $C \ll B$. Compare los resultados.

XIV.42 Determine al orden significativo más bajo en η la modificación a las energías propias de un átomo hidrogenoide perturbado por el potencial

$$H' = \eta \frac{\hbar^2}{2m_0 r^2}.$$

En particular, muestre que la degeneración en l se rompe, por pequeño que sea el valor de η.

XIV.43 Demuestre que las funciones propias exactas del sistema de dos niveles discutido en el problema XIV.22 se pueden escribir en la forma

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= e^{-i\phi/2} \cos\frac{\theta}{2} |\varphi_1\rangle + e^{i\phi/2} \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} |\varphi_2\rangle\,, \\ |\psi_+\rangle &= -e^{-i\phi/2} \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} |\varphi_1\rangle + e^{i\phi/2} \cos\frac{\theta}{2} |\varphi_2\rangle\,, \end{aligned}$$

donde los ángulos se han definido mediante las relaciones ($0 \leq \theta \leq \pi$)

$$\tan\theta = \frac{2\left|\hat{H}_{12}\right|}{\hat{H}_{11} - \hat{H}_{22}}, \quad e^{i\phi} = \frac{\hat{H}_{21}}{\left|\hat{H}_{21}\right|}.$$

Desarrolle las expresiones anteriores para obtener las que predice la teoría de perturbaciones a orden más bajo, y muestre que, para niveles muy separados, las funciones de onda perturbadas son muy cercanas a las correspondientes no perturbadas, pero que para niveles muy cercanos (o degenerados) se obtienen estados muy diferentes, caracterizados por una superposición de ambos estados con amplitudes de magnitud similar (éstas corresponden a las funciones de onda correctas de la teoría de perturbaciones). El resultado muestra que los estados cuánticos sufren fácilmente modificaciones muy importantes en la vecindad de los puntos donde se cruzan estados no perturbados.

XIV.44 Determine las funciones de onda corregidas a primer orden en la teoría de perturbaciones para el problema XIV.24.

XIV.45 Determine el operador que realiza la transformación canónica de Bogolyubov construida en el problema XIV.27.

XIV.46 El quarkonio es un sistema ligado de un quark y su correspondiente antiquark en un estado s. Se considera que a distancias no muy grandes el potencial de interacción quark-antiquark se puede escribir (despreciando efectos relativistas, de espín, etc.) en la forma de un potencial "coulombiano", más un término lineal de confinamiento, es decir,

$$V_{q\bar{q}} = -\frac{k_c}{r} + k^2 r.$$

En el caso particular del quark t, el término coulombiano es dominante y el de confinamiento puede tomarse como una perturbación.[14] Demuestre que con estas consideraciones los niveles de energía del sistema son

$$E_{nl} = -\frac{k_c^2 m_t}{2\hbar^2 n^2} + \frac{k^2\hbar^2}{k_c m_t}\left(3n^2 - l(l+1)\right), \quad m_t = \tfrac{1}{2}M_t,$$

donde M_t es la masa del quark t, estimada como del orden de 90 GeV, es decir, aproximadamente 96 veces la masa del protón.

XIV.47 Considere una distribución de probabilidad de la forma

$$P(\varphi) = Ne^{-\varphi^2/2a - (g/4!)\varphi^4}.$$

Esta densidad no se puede integrar de manera cerrada, pero puede aproximarse con un desarrollo en serie, lo que proporciona un ejemplo elemental de desarrollo perturbativo. Demuestre que para g suficientemente pequeña la función de partición es

$$Z = N\sqrt{2\pi a}\left(1 - \tfrac{1}{8}ga^2 + \tfrac{35}{384}g^2a^4 + \cdots\right),$$

mientras que el segundo momento vale

$$\left\langle\varphi^2\right\rangle = a\left(1 - \tfrac{1}{2}ga^2 + \tfrac{2}{3}g^2a^4 + \cdots\right).$$

¿Para cuáles valores de g son legítimas estas aproximaciones?

[14] Los nombres adoptados para los quarks son de fantasía y no poseen significado físico alguno, por lo que llamarles simplemente por la correspondiente letra inicial (del inglés es la costumbre) es perfectamente adecuado. La t proviene de *top*; los nombres usuales de los otros quarks son b, c, d, s, u (de *bottom* o *beauty*, *charm*, *down*, *strange*, *up*, respectivamente).

XV. El espín del electrón

XV.1. Problemas del texto

XV.1 Demuestre que

$$\left[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}},\hat{J}_i\right]=0,$$

$$\left[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}},\hat{\mathbf{J}}^2\right]=\left[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}},\hat{\mathbf{L}}^2\right]=\left[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}},\hat{\mathbf{S}}^2\right]=0\,.$$

Las componentes del operador de espín $\hat{\mathbf{S}}$ conmutan con las componentes del operador de momento angular orbital $\hat{\mathbf{L}}$, debido a que operan en diferentes espacios. Además, como $\hat{\mathbf{L}},\hat{\mathbf{S}}$ y $\hat{\mathbf{J}}$ son todos operadores de momento angular, cumplen con las correspondientes leyes de conmutación, ecuaciones (T12.18), (T12.21), (T12.67) y (T12.68):

$$\left[\hat{\mathbf{L}}^2,\hat{L}_i\right]=0,\qquad\left[\hat{L}_i,\hat{L}_j\right]=i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k,\tag{XV.1}$$

$$\left[\hat{\mathbf{S}}^2,\hat{S}_i\right]=0,\qquad\left[\hat{S}_i,\hat{S}_j\right]=i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k,\tag{XV.2}$$

$$\left[\hat{\mathbf{J}}^2,\hat{J}_i\right]=0,\qquad\left[\hat{J}_i,\hat{J}_j\right]=i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k.\tag{XV.3}$$

De estas relaciones y de $\hat{\mathbf{J}}=\hat{\mathbf{L}}+\hat{\mathbf{S}}$, sigue que[1]

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}},\hat{J}_i\right]&=\left[\hat{L}_j\hat{S}_j,\hat{L}_i+\hat{S}_i\right]=-\left[\hat{L}_i,\hat{L}_j\right]\hat{S}_j-\hat{L}_j\left[\hat{S}_i,\hat{S}_j\right]\\&=-i\hbar\left(\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k\hat{S}_j+\varepsilon_{ijk}\hat{L}_j\hat{S}_k\right).\end{aligned}$$

Si intercambiamos el nombre de los índices mudos en el primer término del lado derecho, y su orden en el segundo, podemos convencernos de que esta expresión se anula:

$$\left[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}},\hat{J}_i\right]=-i\hbar\left(\varepsilon_{ikj}\hat{L}_j\hat{S}_k-\varepsilon_{ikj}\hat{L}_j\hat{S}_k\right)=0.\tag{XV.4}$$

Extendiendo el proceso, podemos escribir

$$\left[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}},\hat{\mathbf{J}}^2\right]=\left[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}},\hat{J}_i\hat{J}_i\right]=\hat{J}_i\left[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}},\hat{J}_i\right]+\left[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}},\hat{J}_i\right]\hat{J}_i=0.\tag{XV.5}$$

[1]Por simplicidad en la escritura, en este capítulo también se omitirán los signos de suma sobre índices repetidos.

Por otro lado, una aplicación directa de (XV.1) da

$$\left[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}},\hat{\mathbf{L}}^2\right]=\left[\hat{L}_i\hat{S}_i,\hat{\mathbf{L}}^2\right]=\left[\hat{L}_i,\hat{\mathbf{L}}^2\right]\hat{S}_i=0, \tag{XV.6}$$

mientras que de (XV.2) sigue

$$\left[\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}},\hat{\mathbf{S}}^2\right]=\left[\hat{L}_i\hat{S}_i,\hat{\mathbf{S}}^2\right]=\hat{L}_i\left[\hat{S}_i,\hat{\mathbf{S}}^2\right]=0. \tag{XV.7}$$

XV.2 En el problema XII.17 se demuestra que todas las funciones analíticas de las matrices de Pauli se pueden reducir a expresiones lineales de ellas y de la matriz unidad 2×2. Dé esta forma a las siguientes expresiones:

$$(1+\sigma_x)^n\,,\quad (1+\sigma_x)^{1/2}\,,\quad (a\sigma_x+b\sigma_y)^2\,,$$

$$\sigma_x^{-k}\,,\quad (a+\sigma_x)^{-1}\quad (a\neq 1)\ .$$

Las propiedades básicas de las matrices de Pauli están dadas por las ecuaciones (XII.117)-(XII.118) del problema XII.16 (que corresponden a las ecuaciones (T15.8)-(T15.9))

$$[\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j]=2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k,\quad \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j+\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i=2\delta_{ij},\quad \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j=\mathbb{I}\delta_{ij}+i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k. \tag{XV.8}$$

En particular, se cumple que

$$\hat{\sigma}_x^2=\hat{\sigma}_y^2=\hat{\sigma}_z^2=\mathbb{I}\,. \tag{XV.9}$$

De esta última igualdad sigue de inmediato que

$$\begin{aligned}(\mathbb{I}+\hat{\sigma}_x)^2&=\mathbb{I}+2\hat{\sigma}_x+\hat{\sigma}_x^2=2\,(\mathbb{I}+\hat{\sigma}_x)\,,\\ (\mathbb{I}+\hat{\sigma}_x)^3&=2\,(\mathbb{I}+\hat{\sigma}_x)^2=2^2\,(\mathbb{I}+\hat{\sigma}_x)\,.\end{aligned} \tag{XV.10}$$

Después de $n-1$ pasos sucesivos similares se obtiene

$$(\mathbb{I}+\hat{\sigma}_x)^n=2^{n-1}\,(\mathbb{I}+\hat{\sigma}_x)\,, \tag{XV.11}$$

que es en efecto una expresión lineal en $\mathbb{I}$ y $\hat{\sigma}_x$. En lo sucesivo, para simplificar la escritura, donde no haya lugar a confusión escribiremos simplemente 1 para denotar la matriz unidad. Extrayendo la raíz cuadrada de (XV.10) y despejando se obtiene

$$(1+\hat{\sigma}_x)^{1/2}=\tfrac{1}{\sqrt{2}}\,(1+\hat{\sigma}_x)\,. \tag{XV.12}$$

Este resultado muestra que (XV.11) se aplica a valores no enteros de n.

Sean ahora a y b dos números reales. Podemos escribir con ayuda de (XV.8)

$$(a\hat{\sigma}_x+b\hat{\sigma}_y)^2=a^2\hat{\sigma}_x^2+ab(\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y+\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x)+b^2\hat{\sigma}_y^2=a^2+b^2. \tag{XV.13}$$

Incidentalmente, observe que de aquí sigue, con c una constante, que

$$(a\hat{\sigma}_x+b\hat{\sigma}_y+c\hat{\sigma}_z)^2=a^2+b^2+c^2; \tag{XV.14}$$

definiendo el vector $\mathbf{q}=(a,b,c)$, (XV.14) establece un resultado muy útil en la teoría del espín del electrón:

$$(\mathbf{q}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2=\mathbf{q}^2, \tag{XV.15}$$

A su vez, observando que $\hat{\sigma}_x^k = \hat{\sigma}_x^{k-2}\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_x^{k-2} = \hat{\sigma}_x^{k-4} = \ldots$, se obtienen los importantes resultados:

$$\begin{array}{rcl} \hat{\sigma}_x^k & = & \hat{\sigma}_x, \text{ si } k \text{ es un entero impar;} \\ \hat{\sigma}_x^k & = & \mathbb{I}, \text{ si } k \text{ es un entero par.} \end{array} \tag{XV.16}$$

Como los valores propios de $\hat{\sigma}_x$ son ± 1, existe $\hat{\sigma}_x^{-1}$; de hecho, de $\hat{\sigma}_x^2 = 1$ sigue que $\hat{\sigma}_x^{-1} = \hat{\sigma}_x$, y, más en general, combinando con las igualdades anteriores, que $\hat{\sigma}_x^{-k} = \hat{\sigma}_x^k$, es decir,

$$\begin{array}{rcl} \hat{\sigma}_x^{-k} & = & \hat{\sigma}_x, \quad \text{para } k \text{ un número impar,} \\ \hat{\sigma}_x^{-k} & = & 1, \quad \text{para } k \text{ un número par.} \end{array} \tag{XV.17}$$

Por último, de la igualdad, válida para $|a| \neq 1$,

$$\left(\frac{\hat{\sigma}_x}{1-a^2} - \frac{a}{1-a^2}\right)(\hat{\sigma}_x + a) = 1$$

sigue de inmediato que

$$(a + \hat{\sigma}_x)^{-1} = \frac{\hat{\sigma}_x - a}{1-a^2}, \quad |a| \neq 1. \tag{XV.18}$$

XV.3 Demuestre detalladamente que

$$e^{i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{n}}\theta} = \cos\theta + i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{n}}\,\operatorname{sen}\theta.$$

Este importante resultado se deriva de manera directa en el problema XII.40, por lo que aquí se dará una demostración alternativa utilizando los resultados del problema XII.17. Colocamos el eje Oz del sistema de referencia a lo largo del eje $\hat{\mathbf{n}}$, para que las direcciones $\hat{\mathbf{n}}$ y $\hat{\mathbf{a}}_z$ coincidan, con lo que el operador $\hat{\sigma}_{\mathbf{n}}$ se transforma en $\hat{\sigma}_{\mathbf{n}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{n}} \to \hat{\sigma}_z$. Con esta selección el problema se reduce a demostrar (sin pérdida de generalidad) que

$$e^{i\hat{\sigma}_z\theta} = \cos\theta + i\hat{\sigma}_z\operatorname{sen}\theta. \tag{XV.19}$$

Puesto que toda función analítica de $\hat{\sigma}_z$ se puede reducir a una función lineal de $\hat{\sigma}_z$ (problema XII.17), es posible escribir

$$e^{i\hat{\sigma}_z\theta} = f(\theta) + i\hat{\sigma}_z g(\theta), \tag{XV.20}$$

donde f y g son dos funciones a determinar, que deben cumplir las condiciones iniciales $f(0) = 1$, $g(0) = 0$. Derivando (XV.20) respecto de θ y tomando en cuenta (XV.9), se obtiene

$$i\hat{\sigma}_z\left(f(\theta) + i\hat{\sigma}_z g(\theta)\right) = -g(\theta) + i\hat{\sigma}_z f(\theta) = f'(\theta) + i\hat{\sigma}_z g'(\theta), \tag{XV.21}$$

es decir,

$$f' = -g; \quad g' = f, \quad \text{con } f'(0) = 0, \quad g'(0) = 1. \tag{XV.22}$$

Derivando una segunda vez, queda

$$f'' = -g' = -f, \quad g'' = f' = -g. \tag{XV.23}$$

Vemos que ambas funciones resuelven la ecuación diferencial $f'' + f = 0$. Las soluciones que satisfacen las condiciones iniciales señaladas son $f(\theta) = \cos\theta$, $g(\theta) = \operatorname{sen}\theta$. Sustituyendo en (XV.20) se obtiene el resultado esperado:

$$e^{i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{n}}\theta} = \cos\theta + i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{n}}\,\operatorname{sen}\theta. \tag{XV.24}$$

XV.4 Demuestre que no existe matriz de dimensión 2×2 distinta de cero, que anticonmute con las tres matrices de Pauli.

Supongamos que existe una matriz $\hat{a}$ de dimensión 2×2, que anticonmuta con las tres matrices de Pauli $\hat{\sigma}_i$. Esto significa que podemos escribir

$$\hat{a}\hat{\sigma}_i + \hat{\sigma}_i\hat{a} = 0\,, \quad i = 1, 2, 3. \tag{XV.25}$$

De aquí sigue $\hat{a}\hat{\sigma}_i = -\hat{\sigma}_i\hat{a}$, lo que, multiplicado por la derecha por $\hat{\sigma}_j$ y volviendo a usar esta misma relación, nos da

$$\hat{a}\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = -\hat{\sigma}_i\hat{a}\hat{\sigma}_j = \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j\hat{a}\,. \tag{XV.26}$$

De aplicar (XV.8) a cada lado de esta igualdad sigue

$$\delta_{ij}\hat{a} + i\hat{a}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k = \delta_{ij}\hat{a} + i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k\hat{a}; \tag{XV.27}$$

que, combinado con (XV.25) da

$$\hat{a}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k = \varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k\hat{a} = -\hat{a}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k. \tag{XV.28}$$

Esta expresión es equivalente a

$$\hat{a}\hat{\sigma}_k = -\hat{a}\hat{\sigma}_k, \tag{XV.29}$$

que muestra que $\hat{a} = 0$ es la única matriz que anticonmuta con las tres matrices de Pauli. Por lo tanto, no existe una matriz 2×2 distinta de cero que anticonmute con las tres matrices de Pauli.

XV.5 El operador que realiza una rotación por un ángulo θ alrededor del eje $\hat{\mathbf{n}}$ está dado por la ecuación (T15.11) y es $\hat{T}_{\hat{n}}\,(\theta) = e^{-i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{n}}\theta/2}$. Demuestre que:

a) $\hat{T}^{\dagger}_{\hat{n}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{T}_{\hat{n}} = \hat{\mathbf{n}}\,(\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}) - \hat{\mathbf{n}}\times(\hat{\mathbf{n}}\times\hat{\boldsymbol{\sigma}})\cos\theta + \hat{\mathbf{n}}\times\hat{\boldsymbol{\sigma}}\,\mathrm{sen}\,\theta$;

b) las relaciones de conmutación de las matrices de Pauli son suficientes para garantizar que el operador $\hat{T}_{\hat{n}}$ con la propiedad a) representa una rotación.

Utilizando (XV.24) podemos escribir para una componente $\hat{\sigma}_j$ de $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$,

$$\begin{aligned}
\hat{T}^{\dagger}_{\hat{n}}\hat{\sigma}_j\hat{T}_{\hat{n}} &= \left(\cos\frac{\theta}{2} + i\hat{\sigma}_k n_k\,\mathrm{sen}\,\frac{\theta}{2}\right)\hat{\sigma}_j\left(\cos\frac{\theta}{2} - i\hat{\sigma}_l n_l\,\mathrm{sen}\,\frac{\theta}{2}\right)\\
&= \hat{\sigma}_j\cos^2\frac{\theta}{2} + \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_l n_k n_l\,\mathrm{sen}^2\frac{\theta}{2} + \frac{i}{2}\left(\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_j - \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_k\right)n_k\,\mathrm{sen}\,\theta\\
&= \hat{\sigma}_j\cos^2\frac{\theta}{2} + \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_l n_k n_l\,\mathrm{sen}^2\frac{\theta}{2} + \varepsilon_{jkl}\hat{\sigma}_l n_k\,\mathrm{sen}\,\theta.
\end{aligned} \tag{XV.30}$$

El segundo término de la derecha se reduce con aplicaciones sucesivas de (XV.8):

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_l n_k n_l &= \hat{\sigma}_k\left(\delta_{jl} + i\varepsilon_{jlm}\hat{\sigma}_m\right)n_k n_l = \hat{\sigma}_k n_k n_j + i\varepsilon_{jlm}\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_m n_k n_l\\
&= \hat{\sigma}_k n_k n_j + i\varepsilon_{jlm}\left(\delta_{km} - i\varepsilon_{knm}\hat{\sigma}_n\right)n_k n_l\\
&= \hat{\sigma}_k n_k n_j + i\varepsilon_{jlk}n_k n_l + (\delta_{jk}\delta_{nl} - \delta_{jn}\delta_{lk})\hat{\sigma}_n n_k n_l\\
&= \hat{\sigma}_k n_k n_j + i\varepsilon_{jlk}n_k n_l + n_j n_l\hat{\sigma}_l - \hat{\sigma}_j.
\end{aligned} \tag{XV.31}$$

Aquí se ha tomado en cuenta que

$$\sum_m \varepsilon_{ijm}\varepsilon_{klm} = \delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{jk} \tag{XV.32}$$

y que $\sum n_k n_k = 1$. Como además se tiene $\varepsilon_{jkl} n_k n_l = 0$ por tratarse de una suma que contiene un factor simétrico y uno antisimétrico, queda

$$\hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_l n_k n_l = 2\hat{\sigma}_k n_k n_j - \hat{\sigma}_j = 2n_j \left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) - \hat{\sigma}_j. \tag{XV.33}$$

Sustituyendo en (XV.30),

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\hat{n}}^{\dagger} \hat{\sigma}_j \hat{T}_{\hat{n}} &= \hat{\sigma}_j \cos^2 \frac{\theta}{2} + \left(2n_j \left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) - \hat{\sigma}_j\right) \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2} + \varepsilon_{jkl} \hat{\sigma}_l n_k \operatorname{sen}\theta \\ &= \hat{\sigma}_j \cos\theta + 2n_j \left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2} + \varepsilon_{jkl} n_k \hat{\sigma}_l \operatorname{sen}\theta. \end{aligned} \tag{XV.34}$$

Este resultado nos permite escribir, multiplicando por el vector unitario $\hat{\mathbf{a}}_j$ y sumando sobre j,

$$\hat{T}_{\hat{n}}^{\dagger} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \hat{T}_{\hat{n}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cos\theta + 2\hat{\mathbf{n}} \left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2} + \left(\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) \operatorname{sen}\theta. \tag{XV.35}$$

Una forma alterna de esta expresión se obtiene usando la fórmula $2\operatorname{sen}^2\theta/2 = 1 - \cos\theta$, lo que da

$$\hat{T}_{\hat{n}}^{\dagger} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \hat{T}_{\hat{n}} = \hat{\mathbf{n}} \left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) - \left[\hat{\mathbf{n}} \left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) - \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right] \cos\theta + \left(\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) \operatorname{sen}\theta, \tag{XV.36}$$

es decir, tomando en cuenta que $\hat{\mathbf{n}} \left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) - \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \hat{\mathbf{n}} \times \left(\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)$,

$$\hat{T}_{\hat{n}}^{\dagger} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \hat{T}_{\hat{n}} = \hat{\mathbf{n}} \left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) - \hat{\mathbf{n}} \times \left(\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) \cos\theta + \hat{\mathbf{n}} \times \hat{\boldsymbol{\sigma}} \operatorname{sen}\theta, \tag{XV.37}$$

que es el resultado solicitado.

El término $\hat{\mathbf{n}} \left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)$ es la componente del vector $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ en la dirección $\hat{\mathbf{n}}$, es decir, es la componente longitudinal, mientras que $-\hat{\mathbf{n}} \times \left(\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) = \hat{\boldsymbol{\sigma}} - \hat{\mathbf{n}} \left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)$ corresponde a la componente transversal de $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$. Luego (XV.37) es una descomposición del operador rotado en sus partes longitudinal y transversal. Como la rotación es sobre el eje $\hat{\mathbf{n}}$, la componente longitudinal no sufre cambio alguno con ella, pero la transversal aparece rotada por el ángulo θ alrededor de este eje. Con $\theta = 0$ la expresión (XV.37) se reduce naturalmente a la descomposición del vector (operador) $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ en sus componentes longitudinal y transversal respecto de un eje en dirección arbitraria $\hat{\mathbf{n}}$:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \hat{\mathbf{n}} \left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) - \hat{\mathbf{n}} \times \left(\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right). \tag{XV.38}$$

El resultado anterior, que evidencia que $\hat{T}_{\hat{n}}$ es efectivamente un operador de rotación, fue establecido usando las ecuaciones (XV.8), provenientes a su vez de las relaciones de conmutación, más la información de que se trata de momento angular $1/2$. Pero el significado geométrico de (XV.37) es totalmente independiente de la magnitud del vector involucrado (por lo que resulta aplicable a operadores que no tienen magnitud definida), como sigue de su homogeneidad respecto a $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$. Luego esta relación depende sólo de las propiedades de conmutación de los operadores de momento angular.

XV.6 Construya los espinores que son eigenfunciones del operador $\hat{S} = \hat{S}_x \cos\theta + \hat{S}_y \operatorname{sen}\theta$ y demuestre que sus eigenvalores son ± 1. Aplique su resultado a los casos particulares $\theta = 0,\ \frac{\pi}{2},\ \pi,\ 2\pi$.

La forma matricial explícita del operador de espín requerido se obtiene introduciendo las matrices de Pauli (T12.108), y es

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2}(\hat{\sigma}_x \cos\theta + \hat{\sigma}_y \operatorname{sen}\theta) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} & 0 \end{pmatrix}. \tag{XV.39}$$

Para encontrar los eigenvectores y eigenvalores de este operador deberemos determinar los valores de a, b y λ tales que se satisfaga la ecuación de valores propios

$$\hat{S}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \tag{XV.40}$$

es decir,

$$\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \tag{XV.41}$$

Desarrollando se obtiene el sistema de ecuaciones homogéneas

$$e^{-i\theta}b - \lambda a = 0, \tag{XV.42}$$
$$e^{i\theta}a - \lambda b = 0. \tag{XV.43}$$

Para que existan soluciones no triviales de este sistema su determinante debe ser nulo:

$$\begin{vmatrix} -\lambda & e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} & -\lambda \end{vmatrix} = 0\,. \tag{XV.44}$$

Una forma alterna de proceder, más rápida y directa, aunque un tanto más formal, consiste en diagonalizar de entrada la matriz $\hat{S}$, escribiendo directamente a partir de (XV.39):

$$\begin{pmatrix} \mu & e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} & \mu \end{pmatrix} = 0, \tag{XV.45}$$

para determinar los eigenvalores μ. Con $\mu = -\lambda$, esta ecuación coincide con (XV.44). Resolviendo se obtiene $\lambda = \pm 1$, lo que muestra que los valores propios del operador $\hat{S}$ son ± 1, como es de esperarse.

Para construir los eigenvectores correspondientes a estos eigenvalores, tomamos primero $\lambda = 1$. Sustituimos en (XV.42) y (XV.43):

$$e^{-i\theta}b = a\,, \quad e^{i\theta}a = b \tag{XV.46}$$

y escribimos a en la forma conveniente, $a = \gamma e^{-i\theta/2}$ (con γ y θ reales), para obtener $b = \gamma e^{i\theta/2}$ y

$$\varphi_+ \equiv \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ e^{i\theta}a \end{pmatrix} = ae^{i\theta/2}\begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} \\ e^{i\theta/2} \end{pmatrix} = \gamma\begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} \\ e^{i\theta/2} \end{pmatrix}. \tag{XV.47}$$

Una vez normalizado a la unidad, este eigenvector se reduce a

$$\varphi_+ = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} \\ e^{i\theta/2} \end{pmatrix}. \tag{XV.48}$$

Para $\lambda = -1$ se procede de manera análoga y se obtiene

$$\varphi_- = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} \\ -e^{i\theta/2} \end{pmatrix}. \tag{XV.49}$$

Para los casos particulares solicitados se obtiene

$$\theta = 0: \qquad \varphi_+ = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \varphi_- = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}; \tag{XV.50}$$

$$\theta = \frac{\pi}{2}: \qquad \varphi_+ = \tfrac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i \\ -1-i \end{pmatrix}, \qquad \varphi_- = \tfrac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1+i \end{pmatrix}; \tag{XV.51}$$

$$\theta = \pi: \qquad \varphi_+ = i\tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \varphi_- = -i\tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \tag{XV.52}$$

$$\theta = 2\pi: \qquad \varphi_+ = -\tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \varphi_- = -\tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \tag{XV.53}$$

Comparando el último resultado con (XV.50) vemos que, como es de esperarse, la transformación $\theta \to \theta + 2\pi$ cambia el signo de estos espinores; los espinores (XV.48)-(XV.49) son invariantes sólo ante la transformación $\theta \to \theta' = \theta + 4\pi$ (dos rotaciones completas del sistema de referencia).

XV.7 Dado el espinor $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{5} \\ 2i/\sqrt{5} \end{pmatrix}$, construya la matriz $\hat{T}$ que lo gira en torno:

a) al eje Oz,

b) a otro eje apropiado,

de tal manera que el estado quede descrito por el espinor $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

De las ecuaciones (T15.13) y (T12.108) sabemos que una rotación alrededor del eje Oz de un espín $1/2$ está descrita por el operador

$$\hat{T}_z(\theta) = \cos\frac{\theta}{2} - i\hat{\sigma}_z \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix}. \tag{XV.54}$$

Como $\psi' = \hat{T}(\theta)\,\psi$ es el espinor resultante de aplicar la rotación descrita por $\hat{T}(\theta)$ al espinor ψ, el problema consiste en encontrar un valor de θ tal que se cumpla que

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \tfrac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2i \end{pmatrix}. \tag{XV.55}$$

Esta expresión matricial es equivalente al par de ecuaciones

$$1 = \tfrac{1}{\sqrt{5}} e^{-i\theta/2}, \quad 0 = i\tfrac{2}{\sqrt{5}} e^{i\theta/2}, \tag{XV.56}$$

que no pueden ser satisfechas para ningún valor de θ. Esto significa que no hay una rotación alrededor del eje z capaz de transformar el espinor $\frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2i \end{pmatrix}$ en el espinor $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Sin embargo, es posible llevar a cabo tal transformación si la rotación se realiza alrededor del eje x, pues en este caso el operador de rotación es

$$\hat{T}_x(\theta) = \cos\frac{\theta}{2} - i\hat{\sigma}_x \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} \\ -i\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \tag{XV.57}$$

y el sistema a resolver está dado por

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \tfrac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} \\ -i\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2i \end{pmatrix}. \tag{XV.58}$$

De aquí obtenemos las condiciones

$$\cos\frac{\theta}{2} + 2\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} = \sqrt{5}, \quad 2\cos\frac{\theta}{2} - \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} = 0, \tag{XV.59}$$

de donde sigue que

$$\operatorname{sen}\frac{\theta}{2} = \tfrac{2}{\sqrt{5}}, \quad \cos\frac{\theta}{2} = \tfrac{1}{\sqrt{5}}. \tag{XV.60}$$

Por lo tanto, la transformación alrededor del eje Ox que nos lleva al resultado buscado es (véase el ejercicio XV.34)

$$\hat{T}_x(\theta) = \tfrac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 & -2i \\ -2i & 1 \end{pmatrix}. \tag{XV.61}$$

XV.8 Resuelva la ecuación de Pauli para partícula libre. ¿Cuáles son las cantidades que se conservan?

La ecuación de Pauli para un electrón que se mueve libremente puede escribirse en la forma (cf. ecuación (T15.24))

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}})^2\,\Psi, \tag{XV.62}$$

donde $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ son las matrices de Pauli. Buscaremos una solución de la forma $\Psi = T(t)\psi$, con $T(t)$ una función que sólo depende del tiempo y $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ un espinor de dos componentes que sólo depende de la posición. Con esto, la ecuación (XV.62) se separa en la forma

$$\left(i\hbar\frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial t}\right)\psi = \frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}})^2\,\psi = \text{const}\psi \equiv E\psi. \tag{XV.63}$$

La dependencia temporal de la función de onda queda dada por la ecuación $i\hbar\dot{T} = ET$, con solución

$$T(t) = e^{-iEt/\hbar}. \tag{XV.64}$$

A su vez, la función de onda espinorial es solución de la ecuación

$$E\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}})^2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \tag{XV.65}$$

Es conveniente simetrizar el operador $(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}})^2$ para obtener (cf. ecuación (XV.15))

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}})^2 = \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j\hat{p}_i\hat{p}_j = \tfrac{1}{2}(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i)\,\hat{p}_i\hat{p}_j = \delta_{ij}\hat{p}_i\hat{p}_j = \hat{\mathbf{p}}^2, \tag{XV.66}$$

lo que conduce a dos ecuaciones de Schrödinger para partícula libre,

$$E\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}, \tag{XV.67}$$

o bien, separando componentes,

$$E\psi_1=\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2\psi_1, \tag{XV.68}$$

$$E\psi_2=\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2\psi_2\,. \tag{XV.69}$$

La solución explícita más general es

$$\Psi=e^{i(-Et+\mathbf{p}\cdot\mathbf{x})/\hbar}\begin{pmatrix}C_1\\ C_2\end{pmatrix},\quad |C_1|^2+|C_2|^2=1. \tag{XV.70}$$

Es claro que ésta es eigenfunción de $\hat{\mathbf{p}}$ (y en consecuencia de $\hat{H}$), por ser solución de la ecuación de Schrödinger para partícula libre. Sin embargo, no es necesariamente eigenfunción de digamos, $\hat{\sigma}_z$, pues se tiene

$$\hat{\sigma}_z\Psi=e^{i(-Et+\mathbf{p}\cdot\mathbf{x})/\hbar}\begin{pmatrix}C_1\\ -C_2\end{pmatrix}\neq \text{const}\cdot\Psi \text{ si } C_1\neq 0 \text{ o si } C_2\neq 0. \tag{XV.71}$$

Además, el valor propio de $\hat{\sigma}_z$ es

$$\langle\Psi|\,\hat{\sigma}_z\,|\Psi\rangle=|C_1|^2-|C_2|^2\,. \tag{XV.72}$$

Este resultado muestra que $|\psi_1|^2$ da la probabilidad de que el electrón tenga su espín hacia arriba (en el punto $\mathbf{r}$ en el tiempo t), mientras que $|\psi_2|^2$ da la probabilidad de que el espín se encuentre orientado hacia abajo. Con la polarización (sobre el eje Oz) definida como (cf. sección 21.5 del texto, ecuaciones (T21.78) y (T21.87))

$$P=\langle\hat{\sigma}_z\rangle\,, \tag{XV.73}$$

la solución corresponde a estados de polarización sobre el eje Oz parcial en general (es decir, $-1\leq P\leq 1$). Esta solución se convierte en función propia de $\hat{\sigma}_z$ (con polarización total sobre el eje Oz, es decir, $P=\pm 1$) cuando uno de los dos coeficientes C_1, C_2 se anula (y el otro se reduce a la unidad en valor absoluto). Es claro que escogiendo adecuadamente los coeficientes C_1, C_2 pueden construirse soluciones que correspondan al mismo momento lineal y energía que la solución anterior, pero que sean estados propios de otros operadores de espín, que representarán la integral de movimiento correspondiente.

La reducción que condujo a la ecuación (XV.67) puede realizarse sin dificultad aun en presencia de un potencial externo $V(\mathbf{r})$, mientras no existan (o se desprecien) efectos magnéticos. Esto significa que es posible interpretar la ecuación de Schrödinger como la ecuación que rige el comportamiento de cada una de las dos componentes del espinor (incluyendo todos los factores), en ausencia de fuerzas que afecten el espín.

XV.9 Sea $\Psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$ una solución de la ecuación de Pauli para cierto problema. Muestre que las componentes ψ_1 y ψ_2 satisfacen un sistema de dos ecuaciones diferenciales lineales acopladas. Muestre que en caso de que exista un campo magnético

uniforme, los términos que acoplan las ecuaciones dependen de B_x y B_y, por lo que si el campo magnético se orienta sobre el eje Oz, ambas componentes se desacoplan, describiendo una los estados con espín hacia arriba, y la otra, aquellos con espín hacia abajo. ¿Se puede usar esta observación para simplificar el problema cuando el campo uniforme está orientado en una dirección arbitraria?

La ecuación de Pauli para una partícula de espín $1/2$ en presencia de un campo electromagnético es la ecuación (T15.26)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\Psi + \left(V - \frac{\hbar e}{2mc}\mathbf{B}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)\Psi\,. \tag{XV.74}$$

Consideraremos sólo el caso en que ni el campo magnético $\mathbf{B}$ ni el potencial V dependen explícitamente del tiempo, y buscaremos una solución de la forma

$$\Psi = e^{-iEt/\hbar}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}, \tag{XV.75}$$

con ψ_1 y ψ_2 independientes del tiempo. De sustituir en (XV.74) y simplificar, resulta

$$E\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + V - \frac{\hbar e}{2mc}\mathbf{B}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right]\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}. \tag{XV.76}$$

Usando la forma explícita de las matrices de Pauli dada por las ecuaciones (XII.97) o (T12.108), se puede escribir

$$\mathbf{B}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} = B_i\hat{\sigma}_i = \begin{pmatrix}B_z & B_x - iB_y\\ B_x + iB_y & -B_z\end{pmatrix}, \tag{XV.77}$$

con lo que (XV.76) toma la forma

$$E\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + V - \frac{\hbar e}{2mc}\begin{pmatrix}B_z & B_x - iB_y\\ B_x + iB_y & -B_z\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}. \tag{XV.78}$$

De aquí se obtiene la pareja de ecuaciones lineales acopladas

$$\left[E - \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - V + \frac{\hbar e}{2mc}B_z\right]\psi_1 + \frac{\hbar e}{2mc}\left(B_x - iB_y\right)\psi_2 = 0, \tag{XV.79}$$

$$\left[E - \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - V - \frac{\hbar e}{2mc}B_z\right]\psi_2 + \frac{\hbar e}{2mc}\left(B_x + iB_y\right)\psi_1 = 0. \tag{XV.80}$$

Vemos que el acoplamiento entre ψ_1 y ψ_2 se produce a través de las componentes B_x y B_y del campo magnético externo. Cuando este campo se orienta sobre el eje Oz, de tal forma que $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ y $B_x = B_y = 0$, las ecuaciones anteriores se desacoplan, y el sistema se reduce al de dos ecuaciones de Schrödinger independientes:

$$E\psi_1 = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi_1 + V\psi_1 - \frac{\hbar e}{2mc}B_z\psi_1, \tag{XV.81}$$

$$E\psi_2 = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi_2 + V\psi_2 + \frac{\hbar e}{2mc}B_z\psi_2. \tag{XV.82}$$

A semejanza de lo que sucede en el caso de la partícula libre discutida en el problema XV.8, ψ_1 describe los estados con espín hacia arriba y ψ_2 los estados

con espín hacia abajo. El campo magnético acopla en general estas dos componentes, por lo que el estado de espín de la partícula puede cambiar de punto a punto, a expensas del momento angular del campo. Sin embargo, si este campo está orientado en la dirección Oz, el espín de cada componente se conserva por separado.

En el caso en que el campo sea uniforme y esté dirigido en una dirección arbitraria, basta orientar el eje Oz del sistema de referencia en tal dirección para simplificar el problema, reduciéndolo al caso anterior. Sin embargo, para campos magnéticos que cambian de dirección con el tiempo o con las coordenadas espaciales, no es posible en general desacoplar las componentes espinoriales, lo que significa que el espín se va reorientando conforme ocurren los cambios en el sistema.

XV.10 Demuestre que si el campo magnético varía sólo con el tiempo la función de onda de Pauli se puede factorizar en una parte espacial que satisface la ecuación de Schrödinger sin campo magnético y una parte espinorial $|\chi\rangle$, solución de la ecuación

$$i\hbar\frac{\partial\left|\chi\left(t\right)\right\rangle}{\partial t}=\mu_0\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{B}\left|\chi\left(t\right)\right\rangle.$$

Cuando $\mathbf{B}$ sólo depende del tiempo, conviene escribir la ecuación de Pauli como sigue:

$$i\hbar\frac{\partial\left|\Psi\right\rangle}{\partial t}+\frac{\hbar e}{2mc}\mathbf{B}\left(t\right)\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\left|\Psi\right\rangle=\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+V\right]\left|\Psi\right\rangle. \tag{XV.83}$$

Proponemos una solución de la forma

$$\left|\Psi\right\rangle=\varphi\left(\mathbf{r}\right)e^{-iEt/\hbar}\left|\chi\left(t\right)\right\rangle, \tag{XV.84}$$

con $|\chi(t)\rangle$ un espinor normalizado ($\langle\chi|\chi\rangle=1$), cuyas dos componentes sólo dependen del tiempo, y $\varphi(\mathbf{r})$ una función (escalar) que depende sólo de la posición. Sustituimos en la ecuación anterior y multiplicamos por la izquierda por $\langle\chi|$, para obtener

$$i\hbar\left\langle\chi\right|\frac{\partial\left|\chi\right\rangle}{\partial t}+\frac{\hbar e}{2mc}\mathbf{B}\left(t\right)\cdot\left\langle\chi\right|\hat{\boldsymbol{\sigma}}\left|\chi\right\rangle=\frac{1}{\varphi}\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+V-E\right]\varphi. \tag{XV.85}$$

Ahora podemos aplicar el método de separación de variables, considerando que cada uno de los dos lados de esta ecuación se reduce a una constante $E'\,\langle\chi|\chi\rangle=E'$; la parte espinorial puede tomarse como solución de la ecuación (se considera un electrón, con $e=-e_0$)

$$i\hbar\frac{\partial\left|\chi\left(t\right)\right\rangle}{\partial t}-\mu_0\mathbf{B}\left(t\right)\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\left|\chi\left(t\right)\right\rangle=E'\left|\chi\left(t\right)\right\rangle, \tag{XV.86}$$

con $\mu_0=\hbar e_0/2m_0c$, el magnetón de Bohr, en tanto que la parte espacial satisface la ecuación de Schrödinger sin campo magnético:

$$(E+E')\varphi=\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+V\right]\varphi. \tag{XV.87}$$

La solución propuesta en el enunciado corresponde a tomar la constante de *separación* E' como cero, es decir, absorberla en la constante E.

Un caso particular del presente problema se estudia en el problema XV.18.

XV.11 Demuestre que

$$\left\langle jj \left| \hat{S}_z \right| jj \right\rangle = \hbar \frac{j(j+1) + s\,(s+1) - l\,(l+1)}{2(j+1)}.$$

Obsérvese que si este resultado se sustituye en la expresión (A) de la nota al pie de la sección 15.3 del texto, se reproduce la ecuación (T15.36) directamente. *Sugerencia*: demuestre primero que $\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \left(\hat{J}_z + 1\right) \hat{S}_z + \hat{S}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_- \hat{S}_+$, en unidades $\hbar = 1$.

Vamos a partir de la ecuación (XII.165), que escribimos en la forma

$$\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \hat{J}_z \hat{S}_z + \hat{J}_+ \hat{S}_- + \hat{J}_- \hat{S}_+. \tag{XV.88}$$

Usamos la regla de conmutación (XII.62) (o (T12.76)) entre componentes $\hat{J}_+$ y $\hat{J}_-$, pero aplicada al espín, es decir,

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_-] = \hbar \hat{S}_z, \tag{XV.89}$$

con lo que podemos escribir (tomaremos en lo que sigue $\hbar = 1$)

$$\hat{J}_+ \hat{S}_- = \left(\hat{L}_+ + \hat{S}_+\right) \hat{S}_- = \hat{S}_- \hat{L}_+ + \hat{S}_+ \hat{S}_- = \hat{S}_- \hat{J}_+ + \hat{S}_z. \tag{XV.90}$$

Sustituyendo en (XV.88) queda

$$\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \left(\hat{J}_z + 1\right) \hat{S}_z + \hat{S}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_- \hat{S}_+. \tag{XV.91}$$

Con ayuda de esta expresión calculamos el valor esperado del operador $\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ sobre el eigenestado $|jm_j\rangle$ que corresponde al máximo valor posible de m_j, $|jj\rangle$. Queda

$$\begin{aligned} \langle jj| \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} |jj\rangle &= \langle jj| \left(\hat{J}_z + 1\right) \hat{S}_z |jj\rangle = j \langle jj| \hat{S}_z |jj\rangle + \langle jj| \hat{S}_z |jj\rangle \\ &= (j+1) \langle jj| \hat{S}_z |jj\rangle, \end{aligned} \tag{XV.92}$$

pues los dos últimos términos de (XV.91) no contribuyen debido a que $\hat{J}_+ |jj\rangle = 0, \langle jj| \hat{J}_- = 0$. Por otro lado, podemos escribir también, elevando al cuadrado la expresión $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}}$ y despejando,

$$\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \tfrac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2\right). \tag{XV.93}$$

Tomando el valor esperado sobre el mismo estado $|jj\rangle$ y combinando con (XV.92), obtenemos

$$\langle jj| \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} |jj\rangle = \tfrac{1}{2} \left(j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)\right) = (j+1) \langle jj| \hat{S}_z |jj\rangle, \tag{XV.94}$$

es decir,

$$\langle jj| \hat{S}_z |jj\rangle = \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2(j+1)}, \tag{XV.95}$$

que es el resultado solicitado.

XV.12 Muestre que en la corrección relativista a la energía cinética del electrón de un átomo hidrogenoide la masa que aparece en el término $-p^4/8m^3c^2$ es la del electrón, no la masa reducida.

En el tratamiento no relativista del átomo de hidrógeno, la energía cinética del sistema electrón-protón, referida al sistema centro de masa, es

$$K = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{p}_p^2}{2m_p} = \mathbf{p}^2 \left(\frac{1}{2m_e} + \frac{1}{2m_p} \right) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \tag{XV.96}$$

donde $m = m_e m_p/(m_e + m_p)$ representa la masa reducida. En el caso relativista la energía cinética debe escribirse en la forma

$$\begin{aligned} K &= \left(\mathbf{p}_e^2 c^2 + m_e^2 c^4\right)^{\frac{1}{2}} + \left(\mathbf{p}_p^2 c^2 + m_p^2 c^4\right)^{\frac{1}{2}} \\ &= m_e c^2 \left(1 + \frac{\mathbf{p}_e^2}{m_e^2 c^2}\right)^{\frac{1}{2}} + m_p c^2 \left(1 + \frac{\mathbf{p}_p^2}{m_p^2 c^2}\right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{XV.97}$$

Para determinar la corrección relativista al valor clásico predicha por (XV.97) es suficiente hacer un desarrollo en serie de potencias y retener los términos de cada contribución hasta el orden deseado de aproximación. Sin embargo, es tan pequeña la relación m_e/m_p, que no tiene sentido conservar las correcciones que vienen del movimiento del protón, por lo que basta escribir

$$\begin{aligned} K &\simeq m_e c^2 \left[1 + \tfrac{1}{2}\frac{\mathbf{p}_e^2}{m_e^2 c^2} - \tfrac{1}{8}\left(\frac{\mathbf{p}_e^2}{m_e^2 c^2}\right)^2 + \cdots\right] + m_p c^2 \left(1 + \tfrac{1}{2}\frac{\mathbf{p}_p^2}{m_p^2 c^2} + \cdots\right), \\ &= m_e c^2 + m_p c^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_p} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3 c^2} + \cdots, \end{aligned} \tag{XV.98}$$

$$K \simeq m_e c^2 + m_p c^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3 c^2} + \cdots, \tag{XV.99}$$

donde se tomó $\mathbf{p}_e^2 = \mathbf{p}_p^2 = \mathbf{p}^2$ para referir todo al sistema CM. El término $(m_e + m_p)c^2$ relacionado con la masa en reposo de las partículas es irrelevante desde el punto de vista dinámico no relativista (juega el papel de una mera constante de referencia de las energías). El resultado muestra que, en efecto, la corrección relativista a la energía cinética depende de la masa del electrón, pero no de la del núcleo.

XV.13 Demuestre que la corrección a la energía de un átomo hidrogenoide, cuyo núcleo se modela como una esfera de radio R_N con distribución uniforme de carga, está dada por

$$\delta E = \frac{2}{5} \frac{Z^4 e^2 R_N^2}{a_0^3 n^3} \delta_{l0}.$$

Observación: en la región nuclear se puede hacer la aproximación $|\psi_{nl}(r)|^2 \simeq |\psi_{nl}(0)|^2$.

La energía potencial del electrón inmerso en el campo generado por el núcleo extenso, tomado como una esfera uniformemente cargada de radio R_N, es

$$V(r) = \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{R_N}\left(\dfrac{3}{2} - \dfrac{1}{2}\dfrac{r^2}{R_N^2}\right), & 0 \le r \le R_N\,, \\ -\dfrac{Ze^2}{r}, & r \ge R_N\,. \end{cases} \tag{XV.100}$$

Este potencial puede tomarse como la suma del potencial coulombiano debido a un núcleo puntual, más una perturbación $\hat{H}'$ dada por

$$\hat{H}'(r) = \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{R_N}\left(\dfrac{3}{2} - \dfrac{1}{2}\dfrac{r^2}{R_N^2}\right) + \dfrac{Ze^2}{r}, & 0 \leq r \leq R_N\,, \\ \\ 0, & r \geq R_N\,. \end{cases} \tag{XV.101}$$

Vemos que la perturbación es distinta de cero sólo en la región ocupada por el núcleo, por lo que debe esperarse que sólo electrones s se vean afectados por ella, ya que éstos son los únicos que tienen probabilidad distinta de cero de visitar la región nuclear, al anularse la barrera centrífuga para ellos.

A primer orden de la teoría de perturbaciones, la corrección a la energía es

$$\delta E = \langle n| \frac{Ze^2}{r} - \frac{3Ze^2}{2R_N} + \frac{Ze^2 r^2}{2R_N^3} |n\rangle\ , \tag{XV.102}$$

donde las integrales deben tomarse sólo dentro de una esfera de radio R_N. Por la pequeñez del núcleo, podemos aproximar la función de onda en la región intranuclear por su valor en el origen y escribir $|\psi_{nl}(r)|^2 \simeq |\psi_{nl}(0)|^2$. Como la función de onda radial es proporcional a r^l, $\psi_{nl}(0)$ resulta diferente de cero sólo para $l = 0$; además, en el origen los polinomios asociados de Legendre valen 1, por lo que finalmente se obtiene que la densidad de electrones en el origen es

$$|\psi_{nl}(0)|^2 = \frac{1}{4\pi}\frac{4}{n^3}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \delta_{l0}\,. \tag{XV.103}$$

Con todo esto tomado en cuenta se obtiene

$$\begin{aligned} \delta E &= \frac{1}{4\pi}\frac{4}{n^3}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \delta_{l0} \\ \delta E &= \frac{1}{4\pi}\frac{4}{n^3}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \delta_{l0} \cdot 4\pi Ze^2 \int_0^{R_N} \left(\frac{1}{r} - \frac{3}{2R_N} + \frac{1}{2R_N^3} r^2\right) r^2 dr, \end{aligned}$$

es decir,

$$\delta E = \frac{2}{5}\frac{Z^4 e^2 R_N^2}{a_0^3 n^3}\delta_{l0} = \frac{2}{5}\frac{Z^4}{n^3} R_N^2 \delta_{l0} \text{ ua.} \tag{XV.104}$$

El factor δ_{l0} muestra que, como se había previsto, sólo los estados s son perturbados. Para el hidrógeno ($Z = 1$) en su estado base ($n = 1$) se obtiene $\delta E = \frac{2}{5} R_N^2$ ua, resultado que es similar en estructura y en orden de magnitud al obtenido en el problema XIV.26 con una distribución exponencial.

XV.14 Calcule los efectos relativistas y del acoplamiento espín-órbita sobre la energía de un oscilador armónico tridimensional isotrópico.

En la sección 15.4 del texto se muestra que tanto el acoplamiento espín-órbita como las correcciones relativistas directas ejercen influencia sobre el espectro atómico al modificar los niveles estacionarios. Estos efectos se resumen en tres correcciones, que para sistemas centrales son:

a) la corrección relativista a la energía cinética (que se rederiva en el problema XV.12),

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m_0^3 c^2}, \tag{XV.105}$$

b) el término de Darwin, debido a las fluctuaciones cuánticas alrededor de la órbita,

$$\hat{H}_2 = \frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2}\nabla^2 V, \tag{XV.106}$$

c) y el efecto directo del acoplamiento entre los momentos orbital y espinorial,

$$\hat{H}_3 = \frac{1}{2m_0^2c^2}\left(\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right)\hat{\mathbf{S}}\cdot\hat{\mathbf{L}}\,. \tag{XV.107}$$

Cuando es posible tomar como base los estados propios $|jlsm_j\rangle$, $\hat{H}_3$ se puede sustituir por el hamiltoniano efectivo

$$\hat{H}_3 = \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}q\left(\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right), \tag{XV.108}$$

con q dado por la ecuación (T15.60),

$$q = j\,(j+1) - l\,(l+1) - s\,(s+1)\,. \tag{XV.109}$$

El presente caso es la aplicación de estas expresiones a un oscilador armónico isotrópico, lo que se puede hacer tomándolas como perturbaciones independientes del tiempo y calculando a primer orden. Para la corrección relativista debida a $\hat{H}_1$ se obtiene, con $|n\rangle \equiv |nlm\rangle$ y usando la aproximación $\hat{p}^2 \simeq 2m\,(E_n - V)$,

$$\begin{aligned}\delta E_1 &= \left\langle n \mid \hat{H}_1 \mid n\right\rangle = -\frac{1}{2m_0c^2}\left\langle n \mid (E_n - V)^2 \mid n\right\rangle \\ &= -\frac{1}{2m_0c^2}\left(E_n^2 - 2E_n\langle n \mid V \mid n\rangle + \tfrac{1}{4}m_0^2\omega^4\left\langle n \mid r^4 \mid n\right\rangle\right). \end{aligned}\tag{XV.110}$$

Como para un oscilador armónico en un estado estacionario el teorema cuántico del virial da $\left\langle \hat{T}\right\rangle = \langle V\rangle = \frac{1}{2}\langle E\rangle$ (véase el problema ilustrativo 9.1 del texto), sigue que los dos primeros términos de la última igualdad se cancelan mutuamente, por lo que la corrección δE_1 se reduce a

$$\delta E_1 = -\frac{m_0\omega^4}{8c^2}\left\langle n \mid r^4 \mid n\right\rangle, \tag{XV.111}$$

resultado que se puede obtener directamente de (XV.105) con la sustitución $\left\langle \hat{\mathbf{p}}^4\right\rangle \rightarrow \left\langle (m_0\omega\mathbf{r})^4\right\rangle$. Para evaluar δE_1 utilizamos la relación de recurrencia derivada en el problema XIII.15 para estados estacionarios y potencial central $V(r)$, ecuación (XIII.168), y que escribimos en la forma

$$2(k+1)E\left\langle r^k\right\rangle - 2(k+1)\left\langle r^k V\right\rangle - \left\langle r^{k+1}V'\right\rangle + \frac{\hbar^2}{m_0}k\left(\frac{k^2-1}{4} - l(l+1)\right)\left\langle r^{k-2}\right\rangle = 0. \tag{XV.112}$$

Para el oscilador armónico debemos tomar $k = 2$ y $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right)$; despejando se obtiene

$$\begin{aligned}\left\langle n \mid r^4 \mid n\right\rangle &= \frac{3E_n}{2m_0\omega^2}\left\langle n \mid r^2 \mid n\right\rangle + \frac{\hbar^2}{2m_0^2\omega^2}\left[\tfrac{3}{4} - l\,(l+1)\right] \\ &= \tfrac{3}{2}\left(\frac{E_n}{m_0\omega^2}\right)^2 + \tfrac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{m_0\omega}\right)^2\left[\tfrac{3}{4} - l\,(l+1)\right]. \\ &= \tfrac{3}{2}\left(\frac{\hbar}{m_0\omega}\right)^2\left(n\,(n+3) + \tfrac{5}{2} - \tfrac{1}{3}l\,(l+1)\right). \end{aligned}\tag{XV.113}$$

La corrección relativista a la energía cinética resulta entonces, de (XV.110),

$$\delta E_1 = -\tfrac{3}{16}\frac{\hbar^2\omega^2}{m_0c^2}\left(n(n+3)+\tfrac{5}{2}-\tfrac{1}{3}l\,(l+1)\right). \qquad \text{(XV.114)}$$

El término de Darwin se reduce para el oscilador isotrópico a

$$\delta E_2 = \left\langle n \mid \hat{H}_2 \mid n \right\rangle = \frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2}\langle n \mid \nabla\cdot(\nabla V) \mid n\rangle = \frac{3}{8}\frac{\hbar^2\omega^2}{m_0c^2}, \qquad \text{(XV.115)}$$

y afecta a todos los niveles por igual, por lo que no modifica el espectro de emisión del oscilador.

La corrección a la energía debida al acoplamiento espín-órbita, si se trata de estados con j y l bien definidas, es

$$\delta E_3 = \left\langle n \mid \hat{H}_3 \mid n \right\rangle = \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}q\,\langle n|\left(\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right)|n\rangle = \frac{\hbar^2\omega^2}{4m_0c^2}q. \qquad \text{(XV.116)}$$

Si el oscilador es un electrón, podemos tomar $s = 1/2$ y escribir

$$\delta E_3 = \frac{\hbar^2\omega^2}{4m_0c^2}\left(j(j+1)-l\,(l+1)-\tfrac{3}{4}\right). \qquad \text{(XV.117)}$$

El efecto simultáneo de las tres correcciones, es decir, la suma de los términos (XV.114)-(XV.116), depende de manera complicada del conjunto de números cuánticos n, j, l, s, rompiéndose en general la degeneración original del oscilador.

XV.15 En el problema XII.39 se vio que es posible considerar un sistema de tres electrones como compuesto por un electrón y un subsistema de dos electrones, en tal forma que el espín total resulte de combinar el espín $1/2$ del electrón suelto con el espín 0 del singulete o el espín 1 del triplete formado por la pareja, según ocurra. En el primero de estos casos se obtienen estados de tres electrones con espín total $1/2$ (un doblete), mientras que en el segundo se pueden obtener estados de tres electrones con espín total $3/2$ (un cuadruplete) o con espín total $1/2$ (un segundo doblete). Este argumento fue usado para mostrar que los $2^3 = 8$ diferentes productos de funciones de espín de un electrón que se producen con los tres electrones se agrupan de manera natural en multipletes con $4 + 2 + 2$ estados de espín de tres electrones. Demuestre que las siguientes ocho combinaciones lineales de estados de espín de tres electrones son ortonormales y corresponden a los valores propios de $\hat{\mathbf{S}}^2 = \left(\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_3\right)^2$ y de $\hat{S}_3 = \hat{S}_{31} + \hat{S}_{32} + \hat{S}_{33}$ indicados.

a) cuadruplete $S = 3/2$ con $S_3 = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$, respectivamente:

$$\begin{gathered}
|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle\,, \\
\tfrac{1}{\sqrt{3}}\left[|+\rangle\,|+\rangle\,|-\rangle + |+\rangle\,|-\rangle\,|+\rangle + |-\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle\right], \\
\tfrac{1}{\sqrt{3}}\left[|+\rangle\,|-\rangle\,|-\rangle + |-\rangle\,|+\rangle\,|-\rangle + |-\rangle\,|-\rangle\,|+\rangle\right], \\
|-\rangle\,|-\rangle\,|-\rangle\,;
\end{gathered}$$

b) primer doblete $S = 1/2$ con $S_3 = 1/2, -1/2$, respectivamente:

$$\begin{aligned}
&\tfrac{1}{\sqrt{6}}\left[|+\rangle\,|+\rangle\,|-\rangle + |+\rangle\,|-\rangle\,|+\rangle - 2\,|-\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle\right], \\
&\tfrac{1}{\sqrt{6}}\left[-\,|-\rangle\,|-\rangle\,|+\rangle - |-\rangle\,|+\rangle\,|-\rangle + 2\,|+\rangle\,|-\rangle\,|-\rangle\right];
\end{aligned}$$

c) segundo doblete $S = 1/2$ con $S_3 = 1/2, -1/2$, respectivamente:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[-\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle+\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\right],$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle-\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle\right].$$

Estos estados fueron construidos paso a paso en el problema XII.39, donde se demostró que corresponden precisamente a los vectores propios de los operadores $\hat{\mathbf{S}}^2$ y $\hat{S}_z$ para el sistema de tres espines $1/2$. Por lo tanto, la segunda parte del problema está ya resuelta, y sólo hace falta verificar la ortonormalidad de estos vectores, aunque para algunos de ellos se demostró ya en el mismo problema, pues esta propiedad fue explícitamente usada en algunos casos. Por la simplicidad de la tarea restante, sólo se mostrará aquí para un par de casos. Consideremos el cuadruplete (con la notación $\varphi_{2S,2S_3}$)

$$\varphi_{33} = \left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle, \tag{XV.118}$$
$$\varphi_{31} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle+\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle+\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\right), \tag{XV.119}$$
$$\varphi_{3-1} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle+\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle+\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\right), \tag{XV.120}$$
$$\varphi_{3-3} = \left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle. \tag{XV.121}$$

Se tiene directamente que

$$\varphi_{33}^{\dagger}\varphi_{33} = \left\langle+\right|\left\langle+\right|\left\langle+\right|\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle = 1, \tag{XV.122}$$
$$\varphi_{31}^{\dagger}\varphi_{31} = \tfrac{1}{3}\left(\left\langle-\right|\left\langle+\right|\left\langle+\right|+\left\langle+\right|\left\langle-\right|\left\langle+\right|+\left\langle+\right|\left\langle+\right|\left\langle-\right|\right)$$
$$\times\left(\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle+\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle+\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\right) = \tfrac{1}{3}\times 3 = 1, \tag{XV.123}$$

etc. Pero a la vez,

$$\varphi_{33}^{\dagger}\varphi_{31} = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left\langle+\right|\left\langle+\right|\left\langle+\right|\left(\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle+\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle+\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\right) = 0, \tag{XV.124}$$
$$\varphi_{31}^{\dagger}\varphi_{3-1} = \tfrac{1}{3}\left(\left\langle-\right|\left\langle+\right|\left\langle+\right|+\left\langle+\right|\left\langle-\right|\left\langle+\right|+\left\langle+\right|\left\langle+\right|\left\langle-\right|\right)$$
$$\times\left(\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle+\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle+\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\right) = 0, \tag{XV.125}$$

etc.; con esto se demuestra la ortonormalidad de los vectores del cuadruplete. Análogamente, para el doblete constituido por los vectores

$$\varphi'_{11} = \tfrac{1}{\sqrt{6}}\left(-2\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle+\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle+\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\right) \tag{XV.126}$$

y

$$\varphi'_{1-1} = \tfrac{1}{\sqrt{6}}\left(-\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle-\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle+2\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\right) \tag{XV.127}$$

se tiene

$$\varphi'^{*}_{11}\varphi'_{11} = \tfrac{1}{6}\left(-2\left\langle+\right|\left\langle+\right|\left\langle-\right|+\left\langle-\right|\left\langle+\right|\left\langle+\right|+\left\langle+\right|\left\langle-\right|\left\langle+\right|\right)$$
$$\times\left(-2\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle+\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle+\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\right) = 1, \tag{XV.128}$$
$$\varphi'^{*}_{11}\varphi'_{1-1} = \tfrac{1}{6}\left(-2\left\langle+\right|\left\langle+\right|\left\langle-\right|+\left\langle-\right|\left\langle+\right|\left\langle+\right|+\left\langle+\right|\left\langle-\right|\left\langle+\right|\right)$$
$$\times\left(-\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle-\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\left|+\right\rangle+2\left|+\right\rangle\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\right) = 0, \tag{XV.129}$$

etc.

XV.2. Problemas adicionales

XV.16 Considere el problema cuántico de una partícula (sin espín, para simplificar) que se mueve en un campo magnético uniforme y constante. Demuestre que la velocidad obedece relaciones de conmutación no triviales, y determine las integrales de movimiento del sistema.

El hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x})\right]^2. \tag{XV.130}$$

La relación entre el operador de velocidad y el de momento es, con $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}}$ (cf. ecuación (T13.67)),

$$\hat{\mathbf{p}} = m\hat{\mathbf{v}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x}), \tag{XV.131}$$

por lo que el hamiltoniano puede escribirse alternativamente en la forma

$$\hat{H} = \tfrac{1}{2}m\hat{\mathbf{v}}^2. \tag{XV.132}$$

Las relaciones de conmutación que involucran a las componentes $\hat{v}_i$ del operador de velocidad siguen de las relaciones usuales de conmutación, cuando se les combina con

$$\hat{v}_i = \frac{1}{m}\left(\hat{p}_i - \frac{e}{c}A_i\right). \tag{XV.133}$$

Un cálculo directo muestra que se cumplen las relaciones previsibles

$$[x_i, \hat{v}_j] = \frac{1}{m}\left[x_i, \hat{p}_j - \frac{e}{c}A_j(\mathbf{x})\right] = \frac{i\hbar}{m}\delta_{ij}. \tag{XV.134}$$

Pero por otro lado se tiene que

$$\begin{aligned}[\hat{v}_i, \hat{v}_j] &= -\frac{e}{m^2c}\left\{[\hat{p}_i, A_j(\mathbf{x})] - [\hat{p}_j, A_i(\mathbf{x})]\right\} \\ &= \frac{i\hbar e}{m^2c}\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right) = \frac{i\hbar e}{m^2c}\varepsilon_{ijk}B_k. \end{aligned}\tag{XV.135}$$

Luego, en presencia de un campo magnético, éste determina el valor del conmutador de las componentes de la velocidad.

Consideremos ahora el momento del momento lineal mecánico, es decir, el operador

$$\hat{\mathbf{M}} = m\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{v}}. \tag{XV.136}$$

Combinando con (XV.133) vemos que, en presencia del campo magnético, $\hat{\mathbf{M}}$ difiere del momento angular orbital $\hat{\mathbf{L}}$:

$$\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{A} = \hat{\mathbf{L}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{A}, \tag{XV.137}$$

por lo que es de mucho interés investigar las propiedades de conmutación de este operador. Se tiene, por ejemplo,

$$\begin{aligned}\left[\hat{M}_x, \hat{M}_y\right] &= m^2\left[\hat{y}\hat{v}_z - \hat{z}\hat{v}_y, \hat{z}\hat{v}_x - \hat{x}\hat{v}_z\right] \\ &= m^2\hat{y}\left\{\hat{z}\left[\hat{v}_z, \hat{v}_x\right] - \left[\hat{z}, \hat{v}_z\right]\hat{v}_x\right\} + m^2\hat{z}^2\left[\hat{v}_x, \hat{v}_y\right] \\ &\quad + m^2\hat{x}\left\{\hat{z}\left[\hat{v}_y, \hat{v}_z\right] + \left[\hat{z}, \hat{v}_z\right]\hat{v}_y\right\} \\ &= \frac{i\hbar e}{c}\left(\hat{y}\hat{z}B_y + \hat{z}^2B_z + \hat{x}\hat{z}B_x\right) + i\hbar m\left(-\hat{y}\hat{v}_x + \hat{x}\hat{v}_y\right) \\ &= i\hbar\left(\hat{L}_z + \frac{e}{c}\hat{z}\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{B}\right), \end{aligned}\tag{XV.138}$$

resultado que puede reescribirse en la forma

$$\begin{aligned}\left[\hat{M}_i, \hat{M}_j\right] &= i\hbar\varepsilon_{ijk}\left[\hat{L}_k + \frac{e}{c}\left(\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{B}\right)\hat{x}_k\right] \\ &= i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{M}_k + i\frac{e\hbar}{c}\varepsilon_{ijk}\left[\left(\hat{\mathbf{r}}\times\mathbf{A}\right)_k + \left(\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{B}\right)\hat{x}_k\right]. \quad \text{(XV.139)}\end{aligned}$$

Estos conmutadores difieren de los de momento angular por el segundo término, lo que significa que el operador $\hat{\mathbf{M}}$ no posee, en general, las propiedades de un momento angular.

Consideremos ahora el caso de un campo uniforme y constante, dirigido sobre el eje Oz. El único conmutador no nulo de las velocidades es

$$[\hat{v}_x, \hat{v}_y] = \frac{i\hbar e}{m^2 c}B = -\frac{i\hbar\omega_c}{m}, \quad \text{(XV.140)}$$

donde se introdujo la frecuencia de ciclotrón

$$\omega_c = -\frac{eB}{mc} = \frac{e_0 B}{mc} \quad (e_0 = -e), \quad \text{(XV.141)}$$

que es la frecuencia con que la partícula clásica gira en torno al eje Oz. Poniendo $\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{r}\times\mathbf{B}$, el potencial vectorial se encuentra sobre el plano xOy, y el movimiento sobre el eje Oz es libre, con $\hat{p}_z = m\hat{v}_z$. Resulta así

$$\hat{v}_x = \frac{\hat{p}_x}{m} - \tfrac{1}{2}\omega_c\hat{y}, \quad \hat{v}_y = \frac{\hat{p}_y}{m} + \tfrac{1}{2}\omega_c\hat{x}, \quad \hat{v}_z = \frac{\hat{p}_z}{m}. \quad \text{(XV.142)}$$

Por lo tanto, el hamiltoniano se separa naturalmente en una parte $\hat{H}_\perp$, que describe el movimiento que ocurre en el plano perpendicular al campo, y otra parte $\hat{H}_\parallel$, que describe el movimiento sobre el eje Oz. En concreto,

$$\hat{H} = \hat{H}_\perp + \hat{H}_\parallel, \quad \text{(XV.143)}$$

$$\hat{H}_\perp = \frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x - \frac{e}{c}A_x\right)^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}A_y\right)^2\right], \quad \text{(XV.144)}$$

$$\hat{H}_\parallel = \frac{1}{2m}\hat{p}_z^2. \quad \text{(XV.145)}$$

Como el movimiento sobre el eje Oz es libre, p_z^2 se conserva. Luego cada una de las dos componentes $\hat{H}_\perp$ y $\hat{H}_\parallel$ del hamiltoniano corresponde por separado a una integral de movimiento. Para aprovechar esta peculiaridad, se construirá una base de vectores propios simultáneos de estos operadores.

Los eigenvectores de $\hat{H}_\parallel$ son inmediatos, pues son los de $\hat{p}_z$, y sus correspondientes valores propios (continuos) son

$$E_\parallel = E_z = \tfrac{1}{2}mv_z^2, \quad \text{(XV.146)}$$

donde v_z es una constante arbitraria real. Para tratar el problema en el plano xOy es conveniente definir las dos velocidades adimensionales

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{m}{\hbar\omega_c}}\hat{v}_x, \quad \hat{R} = \sqrt{\frac{m}{\hbar\omega_c}}\hat{v}_y. \quad \text{(XV.147)}$$

De (XV.140) sigue que

$$\left[\hat{Q}, \hat{R}\right] = i \quad \text{(XV.148)}$$

y de (XV.144) que

$$\hat{H}_\perp = \tfrac{1}{2}\hbar\omega_c \left[\hat{Q}^2 + \hat{R}^2\right]. \tag{XV.149}$$

De esta manera, $\hat{Q}$ y $\hat{R}$ juegan el papel de la pareja de operadores $\hat{x}$, $\hat{p}$ de un oscilador armónico de frecuencia ω_c; los correspondientes operadores de creación y aniquilación se obtienen directamente de (XI.121) y (XI.122) (o de (T11.42)), y son

$$\hat{a}_\perp = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{Q} + i\hat{R}\right), \quad \hat{a}_\perp^\dagger = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{Q} - i\hat{R}\right). \tag{XV.150}$$

Los eigenvalores de la energía de estos osciladores son discretos,

$$E_\perp = \hbar\omega_c\left(n + \tfrac{1}{2}\right). \tag{XV.151}$$

Podemos utilizar (XV.151) para definir un radio medio (efectivo) de rotación R_{ef} de la partícula alrededor del eje Oz mediante la expresión

$$E_\perp = \tfrac{1}{2}m\omega_c^2 R_{\text{ef}}^2; \tag{XV.152}$$

el operador asociado a R_{ef}^2, que denotaremos con $\hat{R}_{\text{ef}}^2$, es entonces

$$\hat{R}_{\text{ef}}^2 = \frac{2}{m\omega_c^2}\hat{H}_\perp \tag{XV.153}$$

y corresponde a una constante de movimiento, con eigenvalor R_{ef}^2 dado por (XV.152), expresión que coincide con la correspondiente fórmula clásica. Las energías propias del hamiltoniano total contienen una parte continua y una cuantizada:

$$E = \hbar\omega_c\left(n + \tfrac{1}{2}\right) + \tfrac{1}{2}mv_z^2. \tag{XV.154}$$

Estas energías son conocidas como *niveles de Landau*.

Usando (XV.142) se obtiene para el hamiltoniano del oscilador la forma alterna

$$\hat{H}_\perp = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2\right) + \tfrac{1}{8}m\omega_c^2\left(x^2 + y^2\right) + \tfrac{1}{2}\omega_c\hat{L}_z, \tag{XV.155}$$

que se puede escribir también como

$$\hat{H}_\perp = \hat{H}_{xy} + \tfrac{1}{2}\omega_c\hat{L}_z, \tag{XV.156}$$

donde $\hat{H}_{xy}$ representa el hamiltoniano de un oscilador bidimensional de frecuencia $\omega = \omega_c/2$, que es la frecuencia de Larmor (véase ejercicio XV.25).

XV.17 Determine la densidad de probabilidad y la densidad de corriente en presencia de un campo electromagnético, predichas por la ecuación de Pauli para un electrón. Discuta sus resultados.

Escribimos la ecuación de Pauli (T15.26) en la forma

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}_0\Psi + \mu_0\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{B}\Psi, \tag{XV.157}$$

con

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + e\phi. \tag{XV.158}$$

La adjunta de esta expresión es

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t} = \hat{H}_0^*\Psi^\dagger + \mu_0\Psi^\dagger\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{B}, \tag{XV.159}$$

donde hemos tomado en cuenta que $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ es un operador hermitiano y el campo magnético $\mathbf{B}$ es real. Multiplicando la ecuación (XV.157) por la izquierda por $\Psi^\dagger$ y la expresión (XV.159) por la derecha por Ψ y restando los resultados, queda

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^\dagger\Psi = \Psi^\dagger\left(\hat{H}_0\Psi\right) - \left(\hat{H}_0^*\Psi^\dagger\right)\Psi. \tag{XV.160}$$

Sustituyendo aquí (XV.158) y simplificando se llega a

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^\dagger\Psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Psi^\dagger\nabla^2\Psi - \left(\nabla^2\Psi^\dagger\right)\Psi\right] + \frac{i\hbar e}{2mc}\left\{\Psi^\dagger\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A} + \mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\Psi\right. \\ &+ \left.\left[\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A} + \mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\Psi^\dagger\right]\Psi\right\}. \end{aligned} \tag{XV.161}$$

El primer término del lado derecho de esta ecuación puede reescribirse como

$$\Psi^\dagger\nabla^2\Psi - \left(\nabla^2\Psi^\dagger\right)\Psi = \boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\Psi^\dagger\boldsymbol{\nabla}\Psi - \left(\boldsymbol{\nabla}\Psi^\dagger\right)\Psi\right], \tag{XV.162}$$

y el segundo,

$$\begin{aligned} &\Psi^\dagger\left[\boldsymbol{\nabla}\cdot A + A\cdot\nabla\right]\Psi + \left[\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot A + A\cdot\nabla\right)\Psi^\dagger\right]\Psi \\ &\qquad = 2\Psi^\dagger\Psi\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot A\right) + 2\mathbf{A}\cdot\left[\Psi^\dagger\boldsymbol{\nabla}\Psi + \left(\boldsymbol{\nabla}\Psi^\dagger\right)\Psi\right] \\ &\qquad = 2\Psi^\dagger\Psi\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot A\right) + 2\mathbf{A}\cdot\nabla\left(\Psi^\dagger\Psi\right) = 2\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\mathbf{A}\Psi^\dagger\Psi\right). \end{aligned} \tag{XV.163}$$

La combinación de estos resultados conduce a la ecuación de continuidad

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^\dagger\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\Psi^\dagger\boldsymbol{\nabla}\Psi - \left(\boldsymbol{\nabla}\Psi^\dagger\right)\Psi\right] + \frac{i\hbar e}{mc}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\mathbf{A}\Psi^\dagger\Psi\right), \tag{XV.164}$$

que puede escribirse en la forma usual

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot j = 0, \tag{XV.165}$$

introduciendo la densidad de partículas (o densidad de probabilidad)

$$\rho = \Psi^\dagger\Psi \tag{XV.166}$$

y la densidad de corriente

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^\dagger\boldsymbol{\nabla}\Psi - \left(\boldsymbol{\nabla}\Psi^\dagger\right)\Psi\right] - \frac{e}{mc}\mathbf{A}\Psi^\dagger\Psi. \tag{XV.167}$$

Para obtener expresiones más explícitas se escriben el espinor y su adjunta en la forma

$$\Psi = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}, \quad \Psi^\dagger = \begin{pmatrix}\psi_1^* & \psi_2^*\end{pmatrix}, \tag{XV.168}$$

donde ψ_1 y ψ_2 son funciones de onda de una componente, que describen los estados de espín "hacia arriba" y "hacia abajo", respectivamente, en el lenguaje convencional. Procediendo, se obtiene

$$\rho = \psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 \tag{XV.169}$$

y

$$\begin{aligned}\mathbf{j} &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_1\boldsymbol{\nabla}\psi_1^* - \psi_1^*\boldsymbol{\nabla}\psi_1\right) - \frac{e}{mc}\mathbf{A}\psi_1\psi_1^* \\ &\quad + \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_2\boldsymbol{\nabla}\psi_2^* - \psi_2^*\boldsymbol{\nabla}\psi_2\right) - \frac{e}{mc}\mathbf{A}\psi_2\psi_2^*. \end{aligned} \tag{XV.170}$$

Estas expresiones muestran que tanto la densidad de probabilidad como la de corriente pueden escribirse como la suma de dos términos, cada uno de ellos asociado a una de las direcciones del espín; no aparecen términos cruzados en ellas.

La densidad de corriente $\mathbf{j}_e \equiv e\mathbf{j}$ dada por (XV.170) no es la densidad total de corriente, como es evidente del hecho de que no depende del espín de la partícula; se trata sólo de la densidad de corriente debida al movimiento orbital de los electrones. El espín del electrón da lugar a un momento magnético, y éste puede generar una corriente; la correspondiente densidad de corriente no aparece en la ecuación de continuidad debido a que ésta expresa la conservación local de la carga en términos de corrientes de convección. Desde el punto de vista formal, el problema tiene su origen en la transición de la ecuación (XV.164) a la (XV.167), pues la corriente $\mathbf{j}$ está determinada hasta el rotacional de un vector, cuya divergencia es idénticamente nula. Para determinar la densidad de corriente de espín, que denotaremos con $\mathbf{j}_s$, podemos partir de las ecuaciones de Maxwell y escribir[2]

$$\boldsymbol{\nabla} \times B = \frac{4\pi}{c}\left[\mathbf{j}_e + c\boldsymbol{\nabla}\times\langle\mathbf{M}\rangle\right], \tag{XV.171}$$

donde $\langle\mathbf{M}\rangle$ representa la magnetización media y tomar a $\langle\mathbf{M}\rangle$ como el momento magnético $-\mu_0\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ (cf. ecuación (T15.7)) promediado sobre los estados de espín

$$\langle\mathbf{M}\rangle = -\mu_0\Psi^\dagger\hat{\boldsymbol{\sigma}}\Psi. \tag{XV.172}$$

Se obtiene así

$$\boldsymbol{\nabla}\times B = \frac{4\pi}{c}\left(\mathbf{j}_e + \mathbf{j}_s\right) = \frac{4\pi}{c}\left[\mathbf{j}_e - c\mu_0\boldsymbol{\nabla}\times\left(\Psi^\dagger\hat{\boldsymbol{\sigma}}\Psi\right)\right], \tag{XV.173}$$

lo que determina la densidad de corriente de espín como

$$\mathbf{j}_s = -c\mu_0\boldsymbol{\nabla}\times\left(\Psi^\dagger\hat{\boldsymbol{\sigma}}\Psi\right) \tag{XV.174}$$

y la corriente total como

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_{e_{\text{total}}} &= \mathbf{j}_e + \mathbf{j}_s \\ &= -\frac{i\hbar e}{2m}\left[\Psi^\dagger\boldsymbol{\nabla}\Psi - \left(\boldsymbol{\nabla}\Psi^\dagger\right)\Psi\right] - \frac{e^2}{mc}\mathbf{A}\Psi^\dagger\Psi - c\mu_0\boldsymbol{\nabla}\times\left(\Psi^\dagger\hat{\boldsymbol{\sigma}}\Psi\right).\end{aligned} \tag{XV.175}$$

Esta definición debe sustituir a la dada por (XV.170). La ecuación (XV.174) muestra que en efecto $\nabla\cdot\mathbf{j}_s = 0$, como era de esperarse del hecho de que este término no aparece en la ecuación de continuidad.

XV.18 Demuestre que el espín de un electrón inmerso en un campo magnético uniforme precesa alrededor de la dirección del campo.

[2] D. J. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 2a. ed. (1975).

La fuerza que actúa sobre una partícula cargada que se mueve siguiendo leyes clásicas en un campo magnético es $(e/c)\,\dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B}$, por lo que resulta perpendicular a su velocidad instantánea; en consecuencia, esta fuerza no realiza trabajo sobre la partícula. En otras palabras, un campo magnético estático cambia la dirección de la velocidad instantánea de la partícula, pero no afecta su energía cinética.

En el caso específico en que el campo magnético uniforme y constante es perpendicular a la velocidad instantánea de la partícula, y en ausencia de cualquier otra fuerza externa, ésta se moverá en un círculo contenido en un plano perpendicular al campo magnético. Como la fuerza magnética es radial y tiene magnitud evB/c, igualándola con la fuerza centrífuga asociada a la órbita circular se obtiene

$$\frac{e_0 B v}{c} = m r \omega^2 \tag{XV.176}$$

(la carga del electrón es $-e_0$), de donde sigue, tomando en cuenta que $v = r\omega$, que la frecuencia angular de rotación de la partícula es

$$\omega = \frac{e_0 B}{mc} \equiv \omega_c = 2\omega_L, \tag{XV.177}$$

donde ω_c es la frecuencia de ciclotrón dada por la ecuación (XV.141) y

$$\omega_L = \frac{e_0 B}{2mc} \tag{XV.178}$$

es la frecuencia de Larmor. Estos resultados clásicos se mantienen al pasar a la descripción cuántica del momento angular orbital, pero requieren revisión en el caso del espín, como se mostrará a continuación.

Como el campo magnético no depende de las coordenadas, para estudiar el comportamiento del espín según la teoría de Pauli podemos utilizar los resultados del problema XV.10. En lo que sigue escribiremos $|\chi(t)\rangle$ en la forma $\chi\,(t)$ para simplificar la notación. Con el eje Oz del sistema de coordenadas orientado en la dirección del campo magnético, la ecuación (XV.86) se reduce a

$$i\hbar \frac{\partial \chi\,(t)}{\partial t} = \mu_0 \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B} \chi\,(t) = -\frac{e\hbar}{2mc} \hat{\sigma}_z B \chi,$$

es decir,

$$\frac{\partial \chi\,(t)}{\partial t} = -i\omega_L \hat{\sigma}_z \chi\,(t)\,. \tag{XV.179}$$

donde ω_L es la frecuencia de Larmor (XV.178). Para $t = 0$, el espinor lo tomamos como

$$\chi(t=0) = a_0 \chi_+ + b_0 \chi_- = \begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix}, \tag{XV.180}$$

donde a_0 y b_0 son constantes que podemos escribir en la forma

$$a_0 = e^{i\gamma} \cos\frac{\theta}{2}, \quad b_0 = e^{i\gamma} \operatorname{sen}\frac{\theta}{2}, \tag{XV.181}$$

de manera de satisfacer automáticamente la condición de normalización,

$$|a_0|^2 + |b_0|^2 = 1. \tag{XV.182}$$

Escribiendo el espinor como el vector columna

$$\chi(t) = a(t)\chi_+ + b(t)\chi_- = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \tag{XV.183}$$

y sustituyendo en (XV.179), se obtiene

$$\begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} = -i\omega_L \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -i\omega_L \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix}, \tag{XV.184}$$

de donde sigue el par de ecuaciones diferenciales

$$\dot{a} = -i\omega_L a, \quad \dot{b} = i\omega_L b. \tag{XV.185}$$

Integrando e introduciendo las condiciones iniciales se obtiene

$$a = a_0 e^{-i\omega_L t}, \quad b = b_0 e^{i\omega_L t}. \tag{XV.186}$$

Por lo tanto, el factor espinorial de la función de onda al tiempo t resulta

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} e^{i\gamma} \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\omega_L t} \\ e^{i\gamma} \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} e^{i\omega_L t} \end{pmatrix}. \tag{XV.187}$$

El valor esperado del espín y la polarización $\mathbf{P}$ están dados por

$$\left\langle \hat{\mathbf{S}} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \hat{\boldsymbol{\sigma}} \rangle = \frac{\hbar}{2} \mathbf{P} = \frac{\hbar}{2} \chi^\dagger \hat{\boldsymbol{\sigma}} \chi, \tag{XV.188}$$

Con las expresiones explícitas de las matrices de Pauli y (XV.187) se obtiene

$$\left\langle \hat{S}_x \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(2\omega_L t) \operatorname{sen}\theta, \tag{XV.189}$$

$$\left\langle \hat{S}_y \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \operatorname{sen}(2\omega_L t) \operatorname{sen}\theta, \tag{XV.190}$$

$$\left\langle \hat{S}_z \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \cos\theta. \tag{XV.191}$$

Vemos que, mientras la componente media del espín (o la polarización) a lo largo de la dirección del campo se conserva, el valor medio de las dos componentes ortogonales al eje Oz oscila con frecuencia doble de la de Larmor, $2\omega_L$. Esto muestra que el espín precede alrededor del eje Oz con frecuencia de ciclotrón $\omega_c = 2\omega_L$. El factor 2 que aparece en esta fórmula proviene de la relación giromagnética característica del espín del electrón (=2); esto se verifica recordando que el valor medio del momento angular orbital precede con frecuencia ω_L alrededor del eje definido por el campo magnético uniforme, como se muestra en la sección 13.5 del texto (cf. ecuación T13.86)).

Una versión más general de este problema se estudia en la sección 21.6 del texto.

XV.19 Determine el comportamiento de una partícula de espín $1/2$ inmersa en un campo homogéneo B_z y un campo magnético adicional (normalmente débil) que oscila (o rota) en el plano perpendicular a B_z con frecuencia angular ω_0.

El campo magnético en el que se encuentra inmersa la partícula se puede describir con la expresión vectorial

$$\mathbf{B} = (B_0 \cos\omega_0 t, B_0 \operatorname{sen}\omega_0 t, B_z). \tag{XV.192}$$

Utilizando los resultados del problema XV.10, el factor espinorial de la función de onda lo escribimos en la forma

$$\chi(t) = a(t)\, e^{-i\omega t}\chi_+ + b(t)\, e^{i\omega t}\chi_- = \begin{pmatrix} a(t)\, e^{-i\omega t} \\ b(t)\, e^{i\omega t} \end{pmatrix}, \tag{XV.193}$$

donde

$$\omega = \frac{\gamma B_z}{\hbar} \tag{XV.194}$$

es la frecuencia de Larmor. Para mayor generalidad, se ha escrito γ en vez de μ_0, lo que permite la aplicación de los resultados a situaciones con diversos valores de la relación giromagnética; en esta notación se tiene $\boldsymbol{\mu} = -(2\gamma/\hbar)\,\mathbf{S}$. Introduciendo (XV.192) y (XV.193) en (XV.86), escrita en la forma

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = \gamma\mathbf{B}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\chi, \tag{XV.195}$$

se obtiene

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} a(t)\, e^{-i\omega t} \\ b(t)\, e^{i\omega t} \end{pmatrix} = \gamma\left(B_0\hat{\sigma}_x\cos\omega_0 t + B_0\hat{\sigma}_y \operatorname{sen}\omega_0 t + B_z\hat{\sigma}_z\right)\begin{pmatrix} a(t)\, e^{-i\omega t} \\ b(t)\, e^{i\omega t} \end{pmatrix}, \tag{XV.196}$$

o bien, explícitamente,

$$\begin{aligned} i\hbar\begin{pmatrix} \dot{a}(t)\, e^{-i\omega t} - i\omega a(t)\, e^{-i\omega t} \\ \dot{b}(t)\, e^{i\omega t} + i\omega b(t)\, e^{i\omega t} \end{pmatrix} &= \gamma\begin{pmatrix} B_z & B_0 e^{-i\omega_0 t} \\ B_0 e^{i\omega_0 t} & -B_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a(t)\, e^{-i\omega t} \\ b(t)\, e^{i\omega t} \end{pmatrix} \\ &= \gamma\begin{pmatrix} B_z a(t)\, e^{-i\omega t} + B_0 b(t)\, e^{i(\omega-\omega_0)t} \\ B_0 a(t)\, e^{i(\omega_0-\omega)t} - B_z b(t)\, e^{i\omega t} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{XV.197}$$

Después de desarrollar y simplificar tomando en cuenta que $\hbar\omega = \gamma B_z$, se obtiene:

$$\dot{a}(t) = -i\omega' b(t)\, e^{i(2\omega-\omega_0)t}, \tag{XV.198}$$

$$\dot{b}(t) = -i\omega' a(t)\, e^{-i(2\omega-\omega_0)t}, \tag{XV.199}$$

donde se ha definido

$$\omega' = \frac{\gamma B_0}{\hbar} = \frac{B_0}{B_z}\omega. \tag{XV.200}$$

Estas ecuaciones se desacoplan derivando la primera y sustituyendo en el resultado la segunda para eliminar $\dot{b}$. Se llega de esta manera a la ecuación diferencial

$$\ddot{a}(t) - i(2\omega - \omega_0)\,\dot{a}(t) + \omega'^2 a(t) = 0. \tag{XV.201}$$

La ecuación característica que determina las frecuencias de oscilación de la amplitud, que denotamos con $\tilde{\omega}$, sigue de (XV.201) escribiendo $a(t) = \text{ const }\cdot e^{i\tilde{\omega}t}$ y es

$$\tilde{\omega}^2 - (2\omega - \omega_0)\,\tilde{\omega} - \omega'^2 = 0, \tag{XV.202}$$

con soluciones

$$\tilde{\omega}_{1,2} = \omega - \tfrac{1}{2}\omega_0 \pm \sqrt{\left(\omega - \tfrac{1}{2}\omega_0\right)^2 + \omega'^2}. \tag{XV.203}$$

Para simplificar la escritura, ponemos

$$\tilde{\omega}_{1,2} = \Omega \pm \delta, \tag{XV.204}$$

con

$$\Omega = \omega - \tfrac{1}{2}\omega_0, \quad \delta = \sqrt{\left(\omega - \tfrac{1}{2}\omega_0\right)^2 + \omega'^2} = \sqrt{\Omega^2 + \omega'^2}. \tag{XV.205}$$

La solución para la función $a(t)$ es

$$a\,(t) = a_1 e^{i(\delta+\Omega)t} + a_2 e^{-i(\delta-\Omega)t}, \tag{XV.206}$$

con a_1 y a_2 constantes a determinar a partir de las condiciones iniciales. Como condición inicial supondremos que la partícula se encuentra en $t = 0$ en el estado de espín χ_+, que corresponde a

$$a\,(t=0) = 1, \quad b\,(t=0) = 0. \tag{XV.207}$$

De aquí y (XV.206) sigue

$$a_1 + a_2 = 1. \tag{XV.208}$$

Para determinar $b\,(t)$ sustituimos (XV.206) en (XV.199), lo que conduce al integrar a

$$b\,(t) = -\frac{e^{-2i\Omega t}}{\omega'}\left[a_1\,(\Omega+\delta)\,e^{i(\Omega+\delta)t} + a_2\,(\Omega-\delta)\,e^{i(\Omega-\delta)t}\right]. \tag{XV.209}$$

De la condición inicial $b\,(t=0) = 0$ sigue

$$a_1\,(\Omega+\delta) + a_2\,(\Omega-\delta) = 0, \tag{XV.210}$$

que, junto con (XV.208), da

$$a_1 = \tfrac{1}{2}\left(1 - \frac{\Omega}{\delta}\right), \quad a_2 = \tfrac{1}{2}\left(1 + \frac{\Omega}{\delta}\right). \tag{XV.211}$$

Finalmente, obtenemos para las amplitudes $a(t)$ y $b(t)$

$$a\,(t) = \left(\cos\delta t - i\frac{\Omega}{\delta}\,\mathrm{sen}\,\delta t\right)e^{i\Omega t}, \tag{XV.212}$$

$$b\,(t) = -i\frac{\omega'}{\delta}\,\mathrm{sen}\,\delta t e^{-i\Omega t}. \tag{XV.213}$$

La probabilidad de que en el tiempo t la partícula esté en el estado χ_+ resulta

$$|a\,(t)|^2 = \cos^2\delta t + \frac{\Omega^2}{\delta^2}\,\mathrm{sen}^2\,\delta t, \tag{XV.214}$$

mientras que la probabilidad de que se encuentre en el estado χ_- es

$$|b\,(t)|^2 = \frac{\omega'^2}{\delta^2}\,\mathrm{sen}^2\,\delta t. \tag{XV.215}$$

Vemos que estas probabilidades oscilan con el tiempo para $\delta \neq 0$, es decir, cualquiera que sea la intensidad no nula de los campos magnéticos.

XV.20 En 1937 el físico americano (austriaco de nacimiento) Isaac I. Rabi propuso el *método de resonancia (magnética) de espín* para medir el momento magnético (nuclear, atómico o molecular). La idea de Rabi fue de gran importancia, pues estimuló muchos desarrollos posteriores, como los asociados a la resonancia magnética de haces moleculares, la espectroscopía de radiofrecuencia, el máser y los relojes

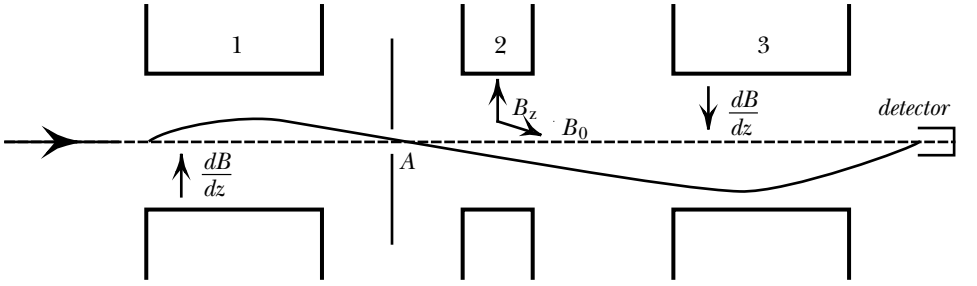


FIGURA XV.1 *Método de Rabi para la medición del momento magnético.*

atómicos, la resonancia nuclear magnética, etc. [3] La figura XV.1 muestra esquemáticamente el método de Rabi. Al cruzar el haz de partículas incidentes la región 1 en la que existe un campo magnético inhomogeneo (campo 1), es deflectado más o menos, dependiendo de la magnitud y orientación de su espín, de tal manera que sólo partículas con cierta dirección del espín logran pasar por la apertura A. El campo magnético homogéneo 2 no afecta la dirección con la que salieron las partículas del campo 1. Cuando el haz trasmitido entra en el campo magnético inhomogéneo 3, cuyo gradiente es precisamente opuesto al del campo 1, se cancela la deflexión de la trayectoría de las partículas, de tal manera que éstas pueden penetrar al interior del detector.

Al campo homogéneo 2 se le agrega ahora un campo magnético oscilante $\mathbf{B}_0$ de frecuencia ω_0, lo que gira el espín de las partículas (como se muestra en el problema anterior); esto impide que el campo 3 compense la deflexión debida al campo 1, y las partículas no llegarán al detector.

Determine la expresión para la frecuencia del campo oscilante (llamada frecuencia de resonancia) que minimiza la intensidad del haz detectado y muestre que su conocimiento (por vía experimental) permite determinar el momento magnético de las partículas del haz incidente.

Sea t_0 el tiempo que una partícula requiere para cruzar la zona en la que opera el campo periódico. Los parámetros del experimento se ajustan para que, al salir las partículas de esta zona, el máximo número posible de ellas esté en el estado χ_-, es decir, de tal forma que para $t = t_0$ la probabilidad $|b\,(t_0)|^2$ definida en el problema anterior sea máxima. De la ecuación (XV.215) es claro que esto sucede para

$$\delta t_0 = \frac{\pi}{2}, \tag{XV.216}$$

o bien, utilizando (XV.204) y (XV.205),

$$t_0 = \frac{\pi}{2\sqrt{\left(\omega - \frac{1}{2}\omega_0\right)^2 + \omega'^2}}. \tag{XV.217}$$

Por otra parte, el tiempo t_0 se puede determinar a partir de la velocidad del haz incidente y de la geometría de la zona ocupada por el campo de radiofrecuencia. Sustituyendo en la expresión anterior el valor de las frecuencias

$$\omega' = \frac{\gamma B_0}{\hbar}, \quad \omega = \frac{\gamma B_z}{\hbar}, \tag{XV.218}$$

[3] Una descripción de estos desarrollos puede verse en el artículo de N. F. Ramsey (uno de los creadores del maser de hidrógeno atómico en 1961) en *Physics Today* de octubre de 1993, p. 40.

se le puede invertir para determinar la magnitud de la relación giromagnética γ en términos de los datos experimentales. El momento magnético se determina de $\boldsymbol{\mu} = -\gamma\boldsymbol{\sigma}$.

XV.21 Entre dos partículas diferentes (que distinguiremos con los índices 1 y 2) de espín $1/2$ y momentos magnéticos $\alpha\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1$ y $\beta\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$ se produce una interacción espín-espín con hamiltoniano $A\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$, con A una constante. Determine los eigenvalores de la energía de este sistema cuando se le coloca dentro de un campo magnético homogéneo.

Con el eje Oz orientado sobre el campo magnético homogéneo, el hamiltoniano del sistema (sin tomar en cuenta la energía cinética) es

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \mathbf{B} - \boldsymbol{\mu}_2 \cdot \mathbf{B} + A\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \\ &= -B\left(\alpha\hat{\sigma}_{1z} + \beta\hat{\sigma}_{2z}\right) + A\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2. \end{aligned} \tag{XV.219}$$

Conviene reescribir este hamiltoniano en la forma

$$\hat{H} = -\tfrac{1}{2}B\left(\alpha+\beta\right)\left(\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z}\right) - \tfrac{1}{2}B\left(\alpha-\beta\right)\left(\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z}\right) + A\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2. \tag{XV.220}$$

En unidades atómicas el espín total del sistema es

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 = \tfrac{1}{2}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2\right), \tag{XV.221}$$

de donde sigue que

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 = 2\hat{\mathbf{S}}^2 - 3. \tag{XV.222}$$

Sustituyendo en (XV.220) se obtiene

$$\hat{H} = -\tfrac{1}{2}B\left(\alpha+\beta\right)\hat{S}_z + A\left(2\hat{\mathbf{S}}^2 - 3\right) - \tfrac{1}{2}B\left(\alpha-\beta\right)\left(\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z}\right). \tag{XV.223}$$

En la representación en que los operadores $\hat{\mathbf{S}}^2$ y $\hat{S}_z$ son diagonales, los dos primeros términos de este hamiltoniano también lo son. Sin embargo, en esta base el último término tiene elementos de matriz sólo fuera de la diagonal principal. Por ejemplo, de

$$\left(\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z}\right)\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_1(1)\,\chi_2(2) - \chi_2(1)\,\chi_1(2)\right) = \tfrac{2}{\sqrt{2}}\left(\chi_1(1)\,\chi_2(2) + \chi_2(1)\,\chi_1(2)\right) \tag{XV.224}$$

sigue

$$\left\langle 10 \mid \hat{H} \mid 00 \right\rangle = -B\left(\alpha-\beta\right), \tag{XV.225}$$

etc. De (XV.223) se obtiene, para los eigenvalores de la energía de los estados del triplete con $S = 1$, $S_z = \pm 1$,

$$E_{\pm} = A \mp \tfrac{1}{2}B\left(\alpha+\beta\right), \tag{XV.226}$$

mientras que para los estados con $S_z = 0$ el hamiltoniano puede representarse con la matriz

$$\hat{H}_{S_z=0} = \begin{pmatrix} A & -\left(\alpha-\beta\right)B \\ -\left(\alpha-\beta\right)B & -3A \end{pmatrix}, \tag{XV.227}$$

cuyos eigenvalores son

$$E_{(0)\pm} = -A \pm \sqrt{4A^2 + \left(\alpha-\beta\right)^2 B^2}, \tag{XV.228}$$

donde el signo superior se refiere a $S = 1$ y el inferior, a $S = 0$.

XV.22 Utilice el formalismo ofrecido por las matrices de Pauli para describir sistemas cuánticos que evolucionan en un espacio de Hilbert bidimensional.

Un espacio —o en su caso, un subespacio— de Hilbert de dos dimensiones queda descrito por dos vectores ortonormales $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$, que pueden tomarse como eigenvectores del hamiltoniano $\hat{H}_0$ del sistema. Con esta selección, los elementos de matriz de $\hat{H}_0$ son H_{11} y H_{22}, y pueden acomodarse en la matriz diagonal

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} H_{11} & 0 \\ 0 & H_{22} \end{pmatrix}. \tag{XV.229}$$

Si a este sistema se le agrega una interacción que no es diagonal en esta base, los estados se mezclan y la matriz que representa el nuevo hamiltoniano (perturbado, si se desea ver así) toma su forma general

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}. \tag{XV.230}$$

Conviene reescribir este hamiltoniano en términos un poco diferentes, definiendo algunas nuevas cantidades. En primer lugar, se introduce la energía promedio y la diferencia de energías (en ambos casos, del sistema "no perturbado"),

$$E_0 = \tfrac{1}{2}(H_{11} + H_{22}), \quad \Delta = \tfrac{1}{2}(H_{11} - H_{22}), \tag{XV.231}$$

que equivale a escribir

$$H_{11} = E_0 + \Delta, \quad H_{22} = E_0 - \Delta. \tag{XV.232}$$

Los términos no diagonales son en general complejos, pero uno es el conjugado del otro, por ser la matriz hermitiana, por lo que escribimos

$$H_{12} = A - iB, \quad H_{21} = A + iB, \tag{XV.233}$$

con A y B reales. El hamiltoniano se transforma en

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 + \Delta & A - iB \\ A + iB & E_0 - \Delta \end{pmatrix}. \tag{XV.234}$$

En términos de las matrices de Pauli y la matriz unidad 2×2, que denotamos con $\hat{\sigma}_0$ (cf. ecuación (XII.121)), $\hat{H}$ toma la forma

$$\hat{H} = E_0\hat{\sigma}_0 + \Delta\hat{\sigma}_3 + A\hat{\sigma}_1 + B\hat{\sigma}_2 \equiv \hat{H}_D + \hat{H}_I, \tag{XV.235}$$

$$\hat{H}_D = E_0\hat{\sigma}_0 + \Delta\hat{\sigma}_3, \quad \hat{H}_I = A\hat{\sigma}_1 + B\hat{\sigma}_2. \tag{XV.236}$$

Vemos que en este formalismo la parte de $\hat{H}$ que depende de las matrices $\hat{\sigma}_1$, $\hat{\sigma}_2$ representa "la interacción", mientras que los términos diagonales $\hat{H}_D$ determinan los eigenvalores de la energía en ausencia de la interacción (perturbación). En otras palabras, el hamiltoniano de perturbación queda dado por un operador no diagonal. Si, extendiendo el formalismo, definimos un vector $\mathbf{F}$ con componentes $\mathbf{F} = (A, B, \Delta)$, podemos escribir formalmente

$$\hat{H} = E_0\hat{\sigma}_0 + \mathbf{F} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \tag{XV.237}$$

Comparando este resultado con el hamiltoniano $\hat{H}_0 + \mu_0\mathbf{B} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ de una partícula de espín $1/2$ en el campo magnético $\mathbf{B}$ (cf. ecuaciones (XV.157) o (T15.28)),

vemos que el vector **F** juega un papel similar al de un campo magnético, y se acopla al "espín" ficticio generado por la bidimensionalidad del espacio de Hilbert. Nótese que son las componentes B_x, B_y del campo ficticio las que representan la interacción, mientras que B_z rompe la degeneración de los dos niveles iniciales, es decir, determina la distancia entre ellos.

El estado general del sistema está descrito por el vector

$$|\psi\rangle = c_+(t)\,|+\rangle + c_-(t)\,|-\rangle\,, \tag{XV.238}$$

donde $|+\rangle$, $|-\rangle$ son los vectores propios de $\hat{\sigma}_3$, con valor propio $+1$, -1, respectivamente. A estos estados corresponden las energías propias[4]

$$\langle +|\,\hat{H}\,|+\rangle = H_{11} = E_0 + \Delta, \quad \langle -|\,\hat{H}\,|-\rangle = H_{22} = E_0 - \Delta. \tag{XV.239}$$

En esta base, a los operadores

$$\hat{\sigma}_+ = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2) = \sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_- = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\sigma}_1 - i\hat{\sigma}_2) = \sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{XV.240}$$

con conmutador

$$[\hat{\sigma}_+, \hat{\sigma}_-] = \hat{\sigma}_3, \tag{XV.241}$$

les corresponde el papel de operadores de ascenso y descenso atómicos, pues

$$\hat{\sigma}_+\,|+\rangle = 0, \quad \hat{\sigma}_+\,|-\rangle = \sqrt{2}\,|+\rangle\,,\ \hat{\sigma}_-\,|-\rangle = 0, \quad \hat{\sigma}_-\,|+\rangle = \sqrt{2}\,|-\rangle\,. \tag{XV.242}$$

Las ecuaciones de movimiento para las variables dinámicas se obtienen directamente de las ecuaciones de Heisenberg,

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\sigma}_s}{\partial t} = \left[\hat{\sigma}_s, \hat{H}\right], \tag{XV.243}$$

donde $\hat{\sigma}_s$ se refiere a cualquiera de los operadores de la teoría. Se obtiene, por ejemplo (haciendo uso de las propiedades de las matrices de Pauli estudiadas con detalle en el problema XII.16),

$$i\hbar\dot{\hat{\sigma}}_3 = [\hat{\sigma}_3, A\hat{\sigma}_1 + B\hat{\sigma}_2] = 2iA\hat{\sigma}_2 - 2iB\hat{\sigma}_1, \tag{XV.244}$$

$$i\hbar\dot{\hat{\sigma}}_1 = [\hat{\sigma}_1, \Delta\hat{\sigma}_3 + B\hat{\sigma}_2] = -2i\Delta\hat{\sigma}_2 + 2iB\hat{\sigma}_3. \tag{XV.245}$$

Vemos que $\hat{\sigma}_3$ evoluciona sólo debido a la interacción, mientras que los operadores no diagonales, como $\hat{\sigma}_1$, evolucionan en ausencia de ella, si no hay degeneración del sistema no perturbado (es decir, si $\Delta \neq 0$).

Las ecuaciones de evolución para las amplitudes $c_+(t)$ y $c_-(t)$ en (XV.238) se obtienen a partir de la ecuación de Pauli,

$$i\hbar\frac{d\,|\psi\rangle}{dt} = (\hat{H}_D + \hat{H}_I)\,|\psi\rangle\,. \tag{XV.246}$$

Con $E_1 = H_{11}$, $E_2 = H_{22}$,

$$i\hbar\frac{dc_+}{dt} = E_1c_+ + H_{12}c_-, \tag{XV.247}$$

$$i\hbar\frac{dc_-}{dt} = E_2c_- + H_{21}c_+. \tag{XV.248}$$

[4]Las energías propias exactas del sistema completo se discuten en el problema XIV.22.

Un método tradicional de resolver este sistema de ecuaciones homogéneas acopladas consiste en considerar los vectores propios del hamiltoniano completo, $|\psi_+\rangle$ (con eigenvalor E_+) y $|\psi_-\rangle$ (con eigenvalor E_-), y expresar el estado inicial en esta base:

$$|\psi(0)\rangle = c_+(0)\,|+\rangle + c_-(0)\,|-\rangle = a_+\,|\psi_+\rangle + a_-\,|\psi_-\rangle\,, \tag{XV.249}$$

con a_+, a_- determinados por las condiciones iniciales. La solución en el tiempo t es

$$|\psi(t)\rangle = a_+ e^{-iE_+t/\hbar}\,|\psi_+\rangle + a_- e^{-iE_-t/\hbar}\,|\psi_-\rangle\,. \tag{XV.250}$$

De aquí se obtienen $c_+(t)$ y $c_-(t)$ proyectando $|\psi(t)\rangle$ sobre $|+\rangle$ y $|-\rangle$, respectivamente.

Otro procedimiento de solución consiste en derivar la ecuación (XV.247) respecto del tiempo y eliminar del resultado las funciones c_- y $\dot{c}_-$ mediante las ecuaciones originales (XV.247)-(XV.248); se obtiene así la ecuación de segundo orden

$$\frac{d^2c_+}{dt^2} + i\frac{\Delta}{\hbar}\frac{dc_+}{dt} - \frac{E_1E_2 - H_{12}H_{21}}{\hbar^2}c_+ = 0. \tag{XV.251}$$

Un procedimiento análogo se utiliza para determinar $c_-(t)$.

A manera de ejemplo vamos a suponer que inicialmente el sistema se encuentra en el estado $|+\rangle$, de manera que $c_+(0) = 1$, $c_-(0) = 0$. Diagonalizando la matriz $\hat{H}$ dada por la ecuación (XV.234) se obtienen los eigenvalores

$$E_\pm = E_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + A^2 + B^2} \tag{XV.252}$$

y los eigenvectores

$$|\psi_+\rangle = \cos\tfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\,|+\rangle + \operatorname{sen}\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\,|-\rangle\,, \tag{XV.253}$$

$$|\psi_-\rangle = -\operatorname{sen}\tfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\,|+\rangle + \cos\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\,|-\rangle\,, \tag{XV.254}$$

donde se puso

$$\tan\theta = \frac{\sqrt{A^2+B^2}}{\Delta}, \quad e^{i\varphi} = \frac{A+iB}{\sqrt{A^2+B^2}}. \tag{XV.255}$$

De (XV.253) y (XV.254) sigue

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle = e^{i\varphi/2}\left(\cos\tfrac{\theta}{2}\,|\psi_+\rangle - \operatorname{sen}\tfrac{\theta}{2}\,|\psi_-\rangle\right), \tag{XV.256}$$

que con ayuda de (XV.250) conduce a

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\varphi/2}\left(\cos\tfrac{\theta}{2}e^{-iE_+t/\hbar}\,|\psi_+\rangle - \operatorname{sen}\tfrac{\theta}{2}e^{-iE_-t/\hbar}\,|\psi_-\rangle\right). \tag{XV.257}$$

La amplitud de la probabilidad del estado $|-\rangle$ en el tiempo t obtenida de aquí es

$$\begin{aligned}
\langle - |\psi(t)\rangle &= e^{i\varphi/2}\left(\cos\tfrac{\theta}{2}e^{-iE_+t/\hbar}\,\langle - |\psi_+\rangle - \operatorname{sen}\tfrac{\theta}{2}e^{-iE_-t/\hbar}\,\langle - |\psi_-\rangle\right) \\
&= e^{i\varphi/2}\left(\cos\tfrac{\theta}{2}e^{-iE_+t/\hbar}\operatorname{sen}\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} - \operatorname{sen}\tfrac{\theta}{2}e^{-iE_-t/\hbar}\cos\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\right) \\
&= \tfrac{1}{2}e^{i\varphi}\operatorname{sen}\theta\left(e^{-iE_+t/\hbar} - e^{-iE_-t/\hbar}\right).
\end{aligned} \tag{XV.258}$$

Luego la correspondiente probabilidad resulta

$$\mathcal{P}_{+\to-} = |\langle - |\psi(t)\rangle|^2 = \tfrac{1}{2}\operatorname{sen}^2\theta\left(1 - \cos\frac{E_+ - E_-}{\hbar}t\right). \tag{XV.259}$$

Este importante resultado (conocido como *fórmula de Rabi*) muestra que la probabilidad de transición $\mathcal{P}_{+\to-}$ oscila con la frecuencia de Bohr $(E_+ - E_-)/\hbar$; esta oscilación se da en ausencia de la interacción, siempre que los niveles no sean degenerados. La máxima amplitud de oscilación ocurre para $\operatorname{sen}\theta = 1$, lo que ocurre, como sigue de (XV.255), para $\Delta = 0$ si $\sqrt{A^2 + B^2} \neq 0$, caso que corresponde a dos niveles no perturbados degenerados, cuya degeneración es rota por la perturbación.

El presente formalismo resulta particularmente útil para el estudio de sistemas cuya descripción puede truncarse a dos estados, como sucede en muchas aplicaciones de la física atómica y de la óptica cuántica.

XV.3. Ejercicios

XV.23 Rederive la ecuación (XV.24) para el operador $\hat{F}(\theta) = e^{i\hat{\sigma}_z\theta}$ a partir de considerar los productos $\hat{F}\hat{F}^*$ y $\hat{F}^2$.

XV.24 Derive las ecuaciones de movimiento y la correspondiente forma del teorema de Ehrenfest para la partícula en un campo magnético descrita en el problema XV.16.

XV.25 Construya las eigenfunciones del hamiltoniano (XV.156) como funciones propias de $\hat{H}_{xy}$ y $\hat{L}_z$.

XV.26 Determine los valores propios de la energía de una partícula cargada (sin espín) que se mueve en un espacio ocupado por un campo eléctrico y uno magnético, ambos uniformes y constantes, cuyas direcciones son mutuamente perpendiculares.

XV.27 Determine las funciones propias del problema anterior.

XV.28 Determine exactamente el espectro energético de un oscilador isotrópico cargado (sin espín), inmerso en un campo magnético uniforme y constante.

XV.29 Un electrón se encuentra en un campo magnético con componentes

$$B_x = 0, \quad B_y = -ky, \quad B_z = B_0 + kz.$$

a) Obtenga las expresiones explícitas para $\hat{x}(t)$, $\hat{y}(t)$ y $\hat{z}(t)$ como funciones del tiempo (tomando en cuenta el momento magnético);

b) considerando que para el tiempo $t = 0$ el estado del electrón está descrito por la función de onda espinorial

$$\psi(t=0) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \varphi(x,y,z) e^{ip_0 x/\hbar},$$

determine el valor medio de las coordenadas y su dispersión en el tiempo t.

XV.30 Un electrón se encuentra en un campo magnético que varía con el tiempo según la ley

$$B_x = B \operatorname{sen}\theta \cos\omega t, \quad B_y = B \cos\theta \operatorname{sen}\omega t, \quad B_z = B\cos\theta.$$

En el tiempo $t = 0$ la proyección del espín en la dirección del campo es $+1/2$. Determine la probabilidad de que la partícula se encuentre en el estado de espín $-1/2$ en la dirección del campo para el tiempo $t > 0$.

XV.31 Demuestre que (se toma $\hbar = 1$)

$$e^{-i\hat{J}_y\theta}\hat{J}_z e^{i\hat{J}_y\theta} = \hat{J}_z\cos\theta + \hat{J}_x\,\mathrm{sen}\,\theta,$$
$$e^{-i\hat{J}_z\theta}\hat{J}_x e^{i\hat{J}_z\theta} = \hat{J}_x\cos\theta + \hat{J}_y\,\mathrm{sen}\,\theta,$$

etc. Utilice estos resultados para mostrar que si ψ_m es función propia de $\hat{J}_z$, entonces $e^{-i\hat{J}_z\varphi}e^{-i\hat{J}_y\theta}\psi_m$ es función propia del operador

$$\hat{J}' = \hat{J}_x\,\mathrm{sen}\,\theta\cos\varphi + \hat{J}_y\,\mathrm{sen}\,\theta\,\mathrm{sen}\,\varphi + \hat{J}_z\cos\theta$$

con el mismo valor propio.

XV.32 Demuestre que la ecuación de evolución del operador $\hat{\sigma}_2$ del problema XV.22 puede escribirse en la forma

$$\ddot{\hat{\sigma}}_2 + \omega_2^2\hat{\sigma}_2 = \frac{4B}{\hbar^2}\left(A\hat{\sigma}_1 + \Delta\hat{\sigma}_3\right), \quad \omega_2 = \frac{2}{\hbar}\sqrt{A^2+\Delta^2}.$$

Este resultado muestra, en particular, que para H_{12} real ($B = 0$) $\hat{\sigma}_2$ equivale a un oscilador de frecuencia ω_2, determinada tanto por la perturbación como por la distancia Δ entre los niveles no perturbados. La presencia del término B indica la aplicación de una excitación al oscilador.

XV.33 Tres partículas de espín $1/2$, colocadas en las esquinas de un triángulo equilátero, están descritas por el hamiltoniano de interacción

$$\hat{H} = \tfrac{1}{3}\lambda\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_3 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_3\right).$$

Enumere los niveles de energía y su degeneración.

XV.34 En el problema XV.7b se encontró que girando el espinor $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{5} \\ 2i/\sqrt{5} \end{pmatrix}$ alrededor del eje Ox puede obtenerse el espinor $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. ¿Puede emplearse algún otro eje $\hat{\mathbf{n}}$ para efectuar la transformación $\hat{T}_{\hat{\mathbf{n}}}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{5} \\ 2i/\sqrt{5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$?

XV.35 Demuestre que la traza del producto de cualquier par de componentes perpendiculares de $\hat{\mathbf{S}}$ para una partícula de espín S, es cero.

XV.36 Evalúe la traza del cuadrado de cualquier componente de $\hat{\mathbf{S}}$ para una partícula de espín S.

XV.37 Considere el espinor

$$\chi(\theta,\varphi) = e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\theta}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + e^{i\varphi/2}\mathrm{sen}\frac{\theta}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Demuestre que un vector arbitrario $\mathbf{F} = F\left(\mathrm{sen}\,\theta\cos\varphi, \mathrm{sen}\,\theta\,\mathrm{sen}\,\varphi, \cos\theta\right)$ se puede escribir en la forma

$$\mathbf{F} = F\chi^\dagger(\theta,\varphi)\hat{\boldsymbol{\sigma}}\chi(\theta,\varphi),$$

en donde $\hat{\sigma}_i, i = 1,2,3$ son las matrices de Pauli. Compare con la ecuación (XV.188) para interpretar este resultado.

XV.38 Utilice el resultado del problema anterior para demostrar que la ecuación clásica

$$\dot{\boldsymbol{\mu}} = \boldsymbol{\omega}_L \times \boldsymbol{\mu}, \quad \boldsymbol{\omega}_L = -ge\mathbf{B}/2mc$$

se transforma en la ecuación de Pauli para la precesión de un momento magnético en reposo en un campo magnético $\mathbf{B}$,

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = -\frac{ge\hbar}{4mc} \mathbf{B} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \chi.$$

XVI. Sistemas de partículas iguales

XVI.1. Problemas del texto

XVI.1 Demuestre que el operador de intercambio de partículas $\hat{P}_{ij}$ es hermitiano y que conmuta con $\hat{P}_{nm}$ sólo cuando (i,j) y (n,m) se refieren a diferentes parejas de partículas.

Si denotamos con $\xi_i = (\mathbf{r}_i, \boldsymbol{\sigma}_i)$ el conjunto de variables espaciales y espinorales de la partícula i (y, en su caso, otras variables portadas por la partícula), el operador de intercambio actúa sobre una función a su derecha en la forma

$$\hat{P}_{ij}\Psi(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots,\xi_N) = \Psi(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_j,\xi_i,\ldots,\xi_N). \tag{XVI.1}$$

Por brevedad, se usará la notación condensada $d\xi = d^3\xi_1 \cdots d^3\xi_N$. Considerando un elemento de matriz de $\hat{P}_{ij}$ entre los estados $\psi(\{\xi_i\})$ y $\varphi(\{\xi_i\})$, tenemos

$$\begin{aligned}
&\int \psi^*(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots,\xi_N)\hat{P}_{ij}\varphi(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots,\xi_N)d\xi \\
&\quad = \int \psi^*(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots,\xi_N)\varphi\left(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_j,\xi_i,\ldots,\xi_N\right)d\xi \\
&\quad = \int \left[\hat{P}_{ji}\psi\left(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_j,\xi_i,\ldots,\xi_N\right)\right]^* \varphi\left(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_j,\xi_i,\ldots,\xi_N\right)d\xi.
\end{aligned} \tag{XVI.2}$$

En la última expresión renombramos los índices mudos con la sustitución $i \leftrightarrow j$, lo que da finalmente

$$\begin{aligned}
&\int \psi^*(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots,\xi_N)\hat{P}_{ij}\varphi(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots,\xi_N)d\xi \\
&\quad = \int \left[\hat{P}_{ij}\psi(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots,\xi_N)\right]^* \varphi(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots,\xi_N)d\xi.
\end{aligned} \tag{XVI.3}$$

Aquí se puede reconocer la condición de hermiticidad (T8.19) aplicada a $\hat{P}_{ij}$, lo que revela que este operador es hermitiano.

Si (i,j) y (n,m) se refieren a diferentes parejas de partículas, se puede realizar la siguiente cadena de operaciones:

$$\begin{aligned}\hat{P}_{ij}\hat{P}_{nm}\Psi(\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots\xi_m,\xi_n,\ldots) &= \hat{P}_{ij}\Psi(\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots\xi_n,\xi_m,\ldots)\\ &= \Psi(\ldots,\xi_j,\xi_i,\ldots\xi_n,\xi_m,\ldots)\\ &= \hat{P}_{nm}\Psi\left(\ldots,\xi_j,\xi_i,\ldots\xi_m,\xi_n,\ldots\right)\\ &= \hat{P}_{nm}\hat{P}_{ij}\Psi(\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots\xi_m,\xi_n,\ldots).\end{aligned} \tag{XVI.4}$$

Como esta igualdad se cumple para Ψ arbitraria, es equivalente a

$$\left[\hat{P}_{ij},\hat{P}_{nm}\right]=0 \quad \text{(todos los índices diferentes).} \tag{XVI.5}$$

Si se repite el ejercicio, pero haciendo coincidir esta vez algún par de índices, se encuentra que la función que se obtiene al final no coincide con la inicial, por lo que no hay ninguna propiedad de conmutación en estos casos. Por ejemplo, con $j=m$ resulta

$$\begin{aligned}\hat{P}_{ij}\hat{P}_{nj}\Psi\left(\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots,\xi_n,\ldots\right) &= \hat{P}_{ij}\Psi\left(\ldots,\xi_i,\xi_n,\ldots,\xi_j,\ldots\right)\\ &= \Psi\left(\ldots,\xi_j,\xi_n,\ldots,\xi_i,\ldots\right), \qquad \text{(XVI.6)}\\ \hat{P}_{nj}\hat{P}_{ij}\Psi\left(\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots,\xi_n,\ldots\right) &= \hat{P}_{nj}\Psi\left(\ldots,\xi_j,\xi_i,\ldots,\xi_n,\ldots\right)\\ &= \Psi\left(\ldots,\xi_n,\xi_i,\ldots,\xi_j,\ldots\right) \qquad \text{(XVI.7)}\end{aligned}$$

por lo que, en efecto,

$$\hat{P}_{ij}\hat{P}_{nj}\neq\hat{P}_{nj}\hat{P}_{ij}. \tag{XVI.8}$$

De (XVI.1) sigue que $\hat{P}_{ij}^2=1$; combinando con la propiedad de hermiticidad $\hat{P}_{ij}^\dagger=\hat{P}_{ij}$ se obtiene $\hat{P}_{ij}^\dagger\hat{P}_{ij}=\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}^\dagger=\hat{P}_{ij}^2=1$, lo que significa que $\hat{P}_{ij}$ también es unitario.

XVI.2 Muestre que los operadores

$$\hat{P}_{ij}^{\pm}\equiv\tfrac{1}{2}\left(1\pm\hat{P}_{ij}\right)$$

son proyectores. ¿Cuál es el efecto de estos operadores sobre una función de estado $\Psi\left(\xi_1,\ldots,\xi_i,\xi_j,\ldots,\xi_N\right)$ totalmente simétrica?

Como se discute en la sección 10.6 del texto, un proyector $\hat{P}$ es un operador hermitiano idempotente, $\hat{P}=\hat{P}^\dagger$, $\hat{P}^2=\hat{P}$. Si $\hat{P}_i$ y $\hat{P}_j$ son dos proyectores sobre los respectivos subespacios $\mathcal{H}_i$ y $\mathcal{H}_j$ del correspondiente espacio de Hilbert, su producto es un proyector (si los subespacios coinciden), o nulo (si los subespacios son disjuntos):

$$\hat{P}_i\hat{P}_j=\hat{P}_j\hat{P}_i=\hat{P}_i\delta_{ij}\,. \tag{XVI.9}$$

En breve, si $i\neq j$, entonces $\hat{P}_i$ y $\hat{P}_j$ son ortogonales y $\hat{P}_i\hat{P}_j=0$; pero si $i=j$, (XVI.9) no es sino la propiedad de idempotencia. De esta última propiedad sigue que los valores propios de un proyector son 0 o 1. Un conjunto de proyectores es completo si $\sum_i\hat{P}_i=1$, donde la suma se extiende sobre todo el espacio de Hilbert del problema.

Consideremos ahora los operadores

$$\hat{P}_{ij}^{\pm}\equiv\tfrac{1}{2}\left(1\pm\hat{P}_{ij}\right). \tag{XVI.10}$$

Como $\hat{P}_{ij}$ es hermitiano, es claro que estos operadores también lo son. Además, cada uno de ellos es idempotente:

$$\left(\hat{P}_{ij}^{\pm}\right)^2 = \tfrac{1}{4}\left(1 \pm 2\hat{P}_{ij} + \hat{P}_{ij}^2\right) = \tfrac{1}{2}\left(1 \pm \hat{P}_{ij}\right) = \hat{P}_{ij}^{\pm}, \tag{XVI.11}$$

y $\hat{P}_{ij}^{+}$ y $\hat{P}_{ij}^{-}$ son mutuamente ortogonales:

$$\hat{P}_{ij}^{+}\hat{P}_{ij}^{-} = \tfrac{1}{4}\left(1 + \hat{P}_{ij}\right)\left(1 - \hat{P}_{ij}\right) = \tfrac{1}{4}\left(1 - \hat{P}_{ij}^2\right) = 0. \tag{XVI.12}$$

Estas propiedades muestran que $\hat{P}_{ij}^{\pm}$ son operadores de proyección, mutuamente ortogonales. Averiguaremos ahora cuál es el subespacio sobre el que proyectan.

Sea $\Psi^S(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N)$ una función de onda simétrica frente al intercambio de cualquier pareja de índices (en breve: totalmente simétrica). Esto significa que para cualquier pareja i, j se cumple que

$$\Psi^S(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N) = \Psi^S(\xi_1, \ldots, \xi_j, \xi_i, \ldots, \xi_N). \tag{XVI.13}$$

Sigue de inmediato que en este caso podemos escribir las igualdades

$$\begin{aligned} \Psi^S(\xi_1, \ldots, \xi_j, \xi_i, \ldots, \xi_N) &= \hat{P}_{ij}\Psi^S(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N) \\ &= \Psi^S(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N), \end{aligned} \tag{XVI.14}$$

de donde sigue

$$\begin{aligned} \hat{P}_{ij}^{+}\Psi^S(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N) &= \tfrac{1}{2}(1 + \hat{P}_{ij})\Psi^S(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N) \\ &= \Psi^S\left(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N'\right). \end{aligned} \tag{XVI.15}$$

De manera similar se demuestra que

$$\hat{P}_{ij}^{-}\Psi^S(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N) = 0. \tag{XVI.16}$$

En palabras: $\hat{P}_{ij}^{+}$ proyecta las funciones de onda totalmente simétricas sobre sí mismas, mientras que $\hat{P}_{ij}^{-}$ cancela la componente totalmente simétrica de la función sobre la que opera.

Sean ahora $\Psi^A(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N)$ funciones totalmente antisimétricas, caracterizadas porque para cualquier pareja i, j se cumple

$$\Psi^A(\xi_1, \ldots, \xi_j, \xi_i, \ldots, \xi_N) = -\Psi^A(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N). \tag{XVI.17}$$

Sigue de inmediato que

$$\hat{P}_{ij}\Psi^A(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N) = -\Psi^A(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N), \tag{XVI.18}$$

$$\hat{P}_{ij}^{+}\Psi^A(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N) = \tfrac{1}{2}(1 + \hat{P}_{ij})\Psi^A(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N) = 0, \tag{XVI.19}$$

$$\hat{P}_{ij}^{-}\Psi^A(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N) = \Psi^A(\xi_1, \ldots, \xi_i, \xi_j, \ldots, \xi_N). \tag{XVI.20}$$

Estos resultados muestran que $\hat{P}_{ij}^{-}$ proyecta a las funciones de onda totalmente antisimétricas sobre sí mismas, mientras que $\hat{P}_{ij}^{+}$ cancela estas componentes.

En breve, $\hat{P}_{ij}^{+}$ es el proyector de estados simétricos y elimina la componente antisimétrica, mientras que $\hat{P}_{ij}^{-}$ es el proyector de estados antisimétricos y elimina la componente simétrica.

XVI.3 Obtenga la solución (T16.38) usando la teoría de perturbaciones para sistemas degenerados. Se considera que las funciones de onda degeneradas son $\psi_\pm$.

En la sección 16.3 del texto se demuestra que la perturbación de un sistema de dos electrones por un potencial simétrico $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ desplaza la energía propia inicial $E^{(0)}$ al valor $E^{(0)}+J\pm K$, donde el signo del último término depende de la simetría o antisimetría de la función de onda respecto al intercambio de las partículas. Las cantidades J y K están dadas por

$$J = \langle mn| V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |mn\rangle = \int |\psi_n(2)|^2 |\psi_m(1)|^2 V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad \text{(XVI.21)}$$

$$K = \int \psi_n^*(1)\psi_m^*(2) V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\psi_n(2)\psi_m(1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad \text{(XVI.22)}$$

Como el potencial es simétrico, el intercambio de $\mathbf{r}_1$ y $\mathbf{r}_2$ en (XVI.21) no afecta el valor de J, y podemos escribir esta cantidad en la forma

$$\begin{aligned} J &= \tfrac{1}{2} \int |\psi_n(2)|^2 |\psi_m(1)|^2 V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ &\quad + \tfrac{1}{2} \int |\psi_n(2)|^2 |\psi_m(1)|^2 V(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ &= \tfrac{1}{2} \int |\psi_n(2)|^2 |\psi_m(1)|^2 V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ &\quad + \tfrac{1}{2} \int |\psi_m(2)|^2 |\psi_n(1)|^2 V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \end{aligned} \quad \text{(XVI.23)}$$

Esta escritura sugiere entender a J como la contribución a la energía debida a que en la mitad de los casos el electrón 1 está en el estado m y el electrón 2 en el n, y en la mitad restante de casos el papel de los dos electrones se intercambia: el electrón 1 queda en el estado n y el 2 en el m. Luego en el análogo clásico, J equivaldría a toda la corrección a la energía a primer orden, suponiendo que ambas configuraciones son igualmente probables. Sin embargo, aparece también el término K, la llamada *energía de intercambio*, la que no tiene análogo clásico, pues está generada por la superposición de amplitudes para la descripción estadística; en este término, el electrón con la etiqueta 1 aparece simultáneamente en parte en el estado m y en parte en el n, y algo similar ocurre con el electrón 2, que también aparece como si estuviera simultáneamente en ambos estados. Como ya sabemos, estos fenómenos de interferencia cuántica se presentan característicamente cuando las funciones de onda no son factorizables.

Considerando el potencial $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ como una perturbación, trataremos el problema con la teoría de perturbaciones de sistemas degenerados. Por ser simétrico, el potencial conmuta con el operador de intercambio $\hat{P}_{12}$, lo que significa que la perturbación no mezcla estados de diferente simetría permutacional. El sistema sin perturbar tiene como estados propios simetrizados a una función de onda orbital de la forma (no factorizable)

$$\psi_\pm = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_n(2)\,\psi_m(1) \pm \psi_n(1)\,\psi_m(2)\right]. \quad \text{(XVI.24)}$$

Por tratarse de electrones, la función de onda total se obtiene multiplicando $\psi_\pm$ por el correspondiente espinor, de tal forma que la función de onda resultante sea antisimétrica. El signo + corresponde por lo tanto al estado de espín 0 (espinor

antisimétrico), mientras que el signo $-$ se asocia al estado de espín 1 (espinor simétrico). Los estados $\psi_\pm$ son degenerados, pues se cumple que

$$\hat{H}_0\psi_\pm = E^{(0)}\psi_\pm. \tag{XVI.25}$$

Las correcciones a la energía a primer orden de la teoría de perturbaciones las obtenemos resolviendo la ecuación secular

$$\begin{vmatrix} V_{++} - \delta E^{(1)} & V_{+-} \\ V_{-+} & V_{--} - \delta E^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \tag{XVI.26}$$

donde hemos puesto $V_{++} = \langle \psi_+ \mid V \mid \psi_+ \rangle$, etc. Explícitamente, para V_{++} o V_{--} se obtiene

$$\begin{aligned} V_{\pm\pm} &= \tfrac{1}{2}\int \left[\psi_n^*(2)\psi_m^*(1) \pm \psi_n^*(1)\psi_m^*(2)\right] V \left[\psi_n(2)\psi_m(1)\right. \\ &\quad \left. \pm \psi_n(1)\psi_m(2)\right] d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ &= \tfrac{1}{2}\left\{\int |\psi_n(2)|^2 |\psi_m(1)|^2 V d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + \int |\psi_n(1)|^2 |\psi_m(2)|^2 V d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\right. \\ &\quad \pm \int \psi_n^*(1)\psi_m^*(2) V \psi_n(2)\psi_m(1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ &\quad \left. + \int \psi_n^*(2)\psi_m^*(1) V \psi_n(1)\psi_m(2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \right\}. \end{aligned} \tag{XVI.27}$$

El intercambio de índices $1 \leftrightarrow 2$ no afecta el valor de estas integrales (se trata de un mero cambio de nombre de las variables de integración), por lo que podemos escribir

$$V_{\pm\pm} = \tfrac{1}{2}\left(2J \pm 2K\right) = J \pm K\,. \tag{XVI.28}$$

De manera similar se obtiene

$$V_{+-} = \int \psi_+^* V \psi_- d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = 0, \tag{XVI.29}$$

$$V_{-+} = 0, \tag{XVI.30}$$

lo que confirma la observación de que la perturbación simétrica no mezcla estados de simetría diferente. En consecuencia, el determinante de la ecuación secular resulta diagonal y el problema se puede tratar como si no fuera degenerado (tal y como se hizo en el texto):

$$\begin{vmatrix} J + K - \delta E^{(1)} & 0 \\ 0 & J - K - \delta E^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \tag{XVI.31}$$

o bien,

$$\left(J + K - \delta E^{(1)}\right)\left(J - K - \delta E^{(1)}\right) = 0\,. \tag{XVI.32}$$

De aquí que las correcciones a la energía a primer orden son

$$\delta E_\pm^{(1)} = J \pm K\,, \tag{XVI.33}$$

es decir, la energía hasta primer orden está dada por

$$E_\pm = E^{(0)} + J \pm K\,, \tag{XVI.34}$$

que es el resultado solicitado, ecuación (T16.38).

El resultado muestra que no es necesaria la presencia de una interacción que involucre explícitamente al espín del electrón para que éste se manifieste: la antisimetrización de la función de onda conduce de manera natural a que entre los estados de espín $S = 0$ y $S = 1$ exista una diferencia de energía de valor $2K$, conocida como *desdoblamiento por intercambio*.

XVI.4 Construya las funciones de onda totalmente simétricas y totalmente antisimétricas para tres partículas iguales sin interacción.

Consideremos tres partículas iguales (indistinguibles), que llamamos 1, 2, 3. Si denotamos con $\xi_i = (\mathbf{r}_i, \boldsymbol{\sigma}_i)$ al conjunto de variables espaciales y espinoriales de la partícula i, la función de onda totalmente simétrica (aplicable al caso de bosones) está dada por

$$\Psi^S = C \sum_P \hat{P} \Psi \left(\xi_1, \xi_2, \xi_3\right) , \tag{XVI.35}$$

donde $\Psi \left(\xi_1, \xi_2, \xi_3\right)$ es una solución apropiada de la ecuación de Schrödinger para las tres partículas, $\hat{P}$ es el operador de intercambio de dos partículas y la suma corre sobre todas las posibles permutaciones por parejas. Si las tres partículas son o pueden tratarse como independientes, $\Psi \left(\xi_1, \xi_2, \xi_3\right)$ se factoriza y podemos escribir

$$\Psi^S = \Psi^S_{n_1 n_2 n_3} = C \sum_P \hat{P} \varphi_{n_1} \left(\xi_1\right) \varphi_{n_2} \left(\xi_2\right) \varphi_{n_3} \left(\xi_3\right) . \tag{XVI.36}$$

Hay seis operadores de permutación para las parejas de las tres partículas, que denotaremos con $\hat{P}_{123}$, $\hat{P}_{132}$, $\hat{P}_{213}$, $\hat{P}_{231}$, $\hat{P}_{312}$, $\hat{P}_{321}$; por lo tanto

$$\begin{aligned} \Psi^S_{n_1 n_2 n_3} &= C \left(\hat{P}_{123} + \hat{P}_{132} + \hat{P}_{213} + \hat{P}_{231} + \hat{P}_{312} + \hat{P}_{321} \right) \\ &\quad \times \varphi_{n_1} \left(\xi_1\right) \varphi_{n_2} \left(\xi_2\right) \varphi_{n_3} \left(\xi_3\right) \\ &= C \left[\varphi_{n_1} \left(\xi_1\right) \varphi_{n_2} \left(\xi_2\right) \varphi_{n_3}(\xi_3) + \varphi_{n_1}(\xi_1) \varphi_{n_3}(\xi_2) \varphi_{n_2}(\xi_3) \right. \\ &\quad + \varphi_{n_2}(\xi_1) \varphi_{n_1}(\xi_2) \varphi_{n_3}(\xi_3) + \varphi_{n_2}(\xi_1) \varphi_{n_3}(\xi_2) \varphi_{n_1}(\xi_3) \\ &\quad \left. + \varphi_{n_3}(\xi_1) \varphi_{n_1}(\xi_2) \varphi_{n_2}(\xi_3) + \varphi_{n_3}(\xi_1) \varphi_{n_2}(\xi_2) \varphi_{n_1}(\xi_3) \right] . \end{aligned} \tag{XVI.37}$$

Se pueden presentar los siguientes casos:

a) Si los estados n_1, n_2, n_3 son diferentes, la función de onda totalmente simétrica es la anterior, con $C = 1/\sqrt{6}$.

b) Si hay sólo dos estados diferentes, por ejemplo $\varphi_{n_3} = \varphi_{n_1}$ (lo que puede suceder, tratándose de bosones), entonces el número de términos diferentes en la ecuación (XVI.37) se reduce a tres, y la única función de onda realizable es

$$\begin{aligned} \Psi^S_{n_1 n_2} &= \tfrac{1}{\sqrt{3}} \left[\varphi_{n_1}(\xi_1) \varphi_{n_1}(\xi_2) \varphi_{n_2}(\xi_3) + \varphi_{n_1}(\xi_1) \varphi_{n_2}(\xi_2) \varphi_{n_1}(\xi_3) \right. \\ &\quad \left. + \varphi_{n_2}(\xi_1) \varphi_{n_1}(\xi_2) \varphi_{n_1}(\xi_3) \right] , \end{aligned} \tag{XVI.38}$$

en donde ya se introdujo la normalización apropiada.

c) Finalmente, si sólo hay un estado ocupado, de tal manera que $n_1 = n_2 = n_3$, la función de onda totalmente simétrica se reduce a

$$\Psi^S_{n_1} = \varphi_{n_1}(\xi_1) \varphi_{n_1}(\xi_2) \varphi_{n_1}(\xi_3). \tag{XVI.39}$$

Para el caso de fermiones, la función de onda es totalmente antisimétrica y da lugar a que se cumpla el principio de exclusión de Pauli, por lo que las tres partículas se encuentran cada una en un estado accesible diferente. Esta función de onda totalmente antisimétrica es

$$\Psi^A = C \sum_P (-1)^{r_P} \varphi_{n_1}(\xi_1) \varphi_{n_2}(\xi_2) \varphi_{n_3}(\xi_3) \tag{XVI.40}$$

(r_P es la paridad de la permutación P), o bien, expresada en forma totalmente equivalente como un determinante de Slater,

$$\Psi^A = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} \varphi_{n_1}(\xi_1) & \varphi_{n_1}(\xi_2) & \varphi_{n_1}(\xi_3) \\ \varphi_{n_2}(\xi_1) & \varphi_{n_2}(\xi_2) & \varphi_{n_2}(\xi_3) \\ \varphi_{n_3}(\xi_1) & \varphi_{n_3}(\xi_2) & \varphi_{n_3}(\xi_3) \end{vmatrix}. \tag{XVI.41}$$

Desarrollando se obtiene

$$\begin{aligned} \Psi^A &= \frac{1}{\sqrt{6}} \big[\varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2)\varphi_{n_3}(\xi_3) - \varphi_{n_1}(\xi_1)\varphi_{n_3}(\xi_2)\varphi_{n_2}(\xi_3) \\ &\quad + \varphi_{n_3}(\xi_1)\varphi_{n_1}(\xi_2)\varphi_{n_2}(\xi_3) - \varphi_{n_2}(\xi_1)\varphi_{n_1}(\xi_2)\varphi_{n_3}(\xi_3) \\ &\quad + \varphi_{n_2}(\xi_1)\varphi_{n_3}(\xi_2)\varphi_{n_1}(\xi_3) - \varphi_{n_3}(\xi_1)\varphi_{n_2}(\xi_2)\varphi_{n_1}(\xi_3)\big]. \end{aligned} \tag{XVI.42}$$

Si dos de los índices n_1, n_2, n_3 se igualan, el determinante (XVI.41) se anula automáticamente, lo que significa que tales estados no se realizan, en consonancia con el principio de exclusión.

XVI.5 Demuestre que si $\psi_{Nn}(x_1, x_2)$ es la función de onda de los dos osciladores del problema XIII.5, entonces

$$\hat{P}_{12}\psi_{Nn} = (-1)^n \psi_{Nn},$$

donde N, n representan el número cuántico del movimiento del centro de masa y relativo, respectivamente.

El problema XIII.5 de dos osciladores acoplados se resolvió usando las coordenadas relativa y de centro de masa,

$$y \equiv y_1 = x_1 - x_2, \tag{XVI.43}$$

$$Y \equiv y_2 = \frac{1}{M}(m_1 x_1 + m_2 x_2), \tag{XVI.44}$$

donde $M = m_1 + m_2$, es la masa total del sistema. En términos de estas coordenadas, el hamiltoniano se reduce al de dos osciladores desacoplados, y la función de onda del sistema se factoriza en la forma

$$\psi_{Nn}(Y, y) = \psi_N(Y)\,\psi_n(y), \tag{XVI.45}$$

donde cada factor es una función de onda de oscilador armónico. En particular,

$$\psi_n(y) = \left(\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega_1}} 2^n n!\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{m\omega_1}{2\hbar} y^2\right) H_n\left(\sqrt{\frac{M\omega_1}{\hbar}}\, y\right), \tag{XVI.46}$$

en donde $\omega_1^2 = \omega^2(1+\beta)$ (β mide la intensidad del acoplamiento).

Ante el intercambio de las partículas 1 y 2, la coordenada relativa cambia su signo, pero la del centro de masa permanece invariante. Por lo tanto,

$$\hat{P}_{12}\psi_{Nn}(y_2, y_1) = \psi_N(y_2)\,\psi_n(-y_1). \tag{XVI.47}$$

La paridad de la $\psi_n(y)$ dada por (XVI.46) corresponde a la del polinomio de Hermite H_n, y es $(-1)^n$ (pues se trata de un polinomio par o impar, según n sea par o impar, respectivamente). De aquí que

$$\hat{P}_{12}\psi_n(y_1) = \psi_n(-y_1) = (-1)^n\,\psi_n(y_1). \tag{XVI.48}$$

Sustituyendo en la ecuación (XVI.47) se llega al resultado solicitado:

$$\hat{P}_{12}\psi_{Nn} = (-1)^n\,\psi_{Nn}. \tag{XVI.49}$$

XVI.6 Un sistema de tres bosones iguales de espín cero tiene el hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{3}\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^{3}\tfrac{1}{2}m\omega^2 x_i^2 + \sum_{j>i}\sum_{i=1}^{3}\tfrac{1}{2}m\omega^2\beta\,(x_i - x_j)^2\,.$$

Demuestre que las variables

$$Z = \tfrac{1}{3}(x_1 + x_2 + x_3)\,, \quad z_1 = x_1 - x_2, \quad z_2 = x_3 - \tfrac{1}{2}(x_1 + x_2)\,,$$

son coordenadas normales y explique su significado. Muestre que, en términos de estas coordenadas, el hamiltoniano toma la forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \tfrac{1}{2}M\omega^2 Z^2 + \frac{\hat{p}_{z_1}^2}{2m_1} + \tfrac{1}{2}m_1\omega_1^2 z_1^2 + \frac{\hat{p}_{z_2}^2}{2m_2} + \tfrac{1}{2}m_2\omega_2^2 z_2^2,$$

donde

$$\hat{P} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 + \hat{p}_3; \quad \hat{p}_{z_1} = \tfrac{1}{2}(\hat{p}_1 - \hat{p}_2)\,; \quad \hat{p}_{z_2} = \tfrac{2}{3}\left(\hat{p}_3 - \frac{\hat{p}_1 + \hat{p}_2}{2}\right);$$
$$\omega_1^2 = \omega_2^2 = \omega^2(1 + 3\beta);$$
$$M = 3m; \quad m_1 = \tfrac{1}{2}m; \quad m_2 = \tfrac{2}{3}m.$$

Este hamiltoniano describe tres osciladores armónicos lineales iguales acoplados, pero se les puede desacoplar al expresarlo en términos de los modos normales. Se trata de demostrar que estos están dados por la transformación

$$Z = \tfrac{1}{3}(x_1 + x_2 + x_3)\,, \quad z_1 = x_1 - x_2\,, \quad z_2 = x_3 - \tfrac{1}{2}(x_1 + x_2)\,; \tag{XVI.50}$$
$$\hat{P} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 + \hat{p}_3\,, \quad \hat{p}_{z_1} = \tfrac{1}{2}(\hat{p}_1 - \hat{p}_2)\,, \quad \hat{p}_{z_2} = \tfrac{2}{3}\left(\hat{p}_3 - \tfrac{1}{2}(\hat{p}_1 + \hat{p}_2)\right). \tag{XVI.51}$$

Invirtiendo se obtiene

$$x_1 = Z + \tfrac{1}{2}z_1 - \tfrac{1}{3}z_2\,, \quad x_2 = Z - \tfrac{1}{2}z_1 - \tfrac{1}{3}z_2\,, \quad x_3 = Z + \tfrac{2}{3}z_2. \tag{XVI.52}$$
$$\hat{p}_1 = \tfrac{1}{3}\hat{P} + \hat{p}_{z_1} - \tfrac{1}{2}\hat{p}_{z_2}\,, \quad \hat{p}_2 = \tfrac{1}{3}\hat{P} - \hat{p}_{z_1} - \tfrac{1}{2}\hat{p}_{z_2}\,, \quad \hat{p}_3 = \tfrac{1}{3}\hat{P} + \hat{p}_{z_2}. \tag{XVI.53}$$

El hamiltoniano escrito en términos de estas variables resulta

$$\begin{aligned}\hat{H} \;=\; & \frac{1}{2m}\left(\tfrac{1}{3}\hat{P}^2 + 2\hat{p}_{z_1}^2 + \tfrac{3}{2}\hat{p}_{z_2}^2\right) \\ & + \tfrac{1}{2}m\omega^2\left(3Z^2 + \tfrac{1}{2}z_1^2 + \tfrac{2}{3}z_2^2\right) + \tfrac{1}{2}m\omega^2\beta\left(\tfrac{3}{2}z_1^2 + 2z_2^2\right).\end{aligned} \tag{XVI.54}$$

Si aquí introducimos las masas

$$M = 3m, \quad m_1 = \tfrac{1}{2}m, \quad m_2 = \tfrac{2}{3}m, \tag{XVI.55}$$

queda

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}_{z_1}^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_{z_2}^2}{2m_2} + \tfrac{1}{2}M\omega^2 Z^2 + \tfrac{1}{2}m_1\omega^2 z_1^2 + \tfrac{1}{2}m_2\omega^2 z_2^2 \\ &\quad + \tfrac{3}{2}m_1\omega^2\beta z_1^2 + \tfrac{3}{2}m_2\omega^2\beta z_2^2,\end{aligned} \tag{XVI.56}$$

que se puede identificar como el hamiltoniano de tres osciladores independientes con frecuencias ω^2, $\omega_1^2 = \omega_2^2 = \omega^2(1+3\beta)$. Luego las nuevas coordenadas corresponden en efecto a los modos normales del sistema. La coordenada Z describe directamente el CM del sistema; z_1 describe la posición relativa de las partículas 1 y 2, mientras que z_2 corresponde a la posición relativa de la partícula 3 respecto del CM del sistema 1-2. Es claro que puede hacerse una permutación arbitraria de estas etiquetas sin modificar el resultado.

XVI.7 En conexión con el problema anterior:

a) demuestre que se satisfacen las relaciones canónicas de conmutación para partículas independientes;

b) obtenga las soluciones de la ecuación de Schrödinger;

c) determine los eigenvalores del hamiltoniano;

d) establezca qué estados son físicamente aceptables. En particular, muestre que:

i) el movimiento del CM no desempeña ningún papel en la simetrización;

ii) no se realizan estados con n_2 impar;

iii) las soluciones con degeneración de intercambio no son necesariamente ortogonales.

a) Demostremos en primer lugar que se satisfacen las relaciones canónicas de conmutación para partículas independientes. De (XVI.50) y (XVI.51) se tiene:

$$\begin{aligned}\left[\hat{P}, Z\right] &= \tfrac{1}{3}\left[\hat{p}_1 + \hat{p}_2 + \hat{p}_3, x_1 + x_2 + x_3\right] \\ &= \tfrac{1}{3}\left([\hat{p}_1, x_1] + [\hat{p}_2, x_2] + [\hat{p}_3, x_3]\right) = -i\hbar, \end{aligned} \tag{XVI.57}$$

$$[\hat{p}_{z_1}, z_1] = \tfrac{1}{2}\left[\hat{p}_1 - \hat{p}_2, x_1 - x_2\right] = \tfrac{1}{2}\left([\hat{p}_1, x_1] + [\hat{p}_2, x_2]\right) = -i\hbar, \tag{XVI.58}$$

$$\begin{aligned}[\hat{p}_{z_2}, z_2] &= \tfrac{2}{3}\left[\hat{p}_3 - \frac{\hat{p}_1 + \hat{p}_2}{2}, x_3 - \frac{x_1 + x_2}{2}\right] \\ &= \tfrac{2}{3}\left([\hat{p}_3, x_3] + \tfrac{1}{4}[\hat{p}_1, x_1] + \tfrac{1}{4}[\hat{p}_2, x_2]\right) = -i\hbar. \end{aligned} \tag{XVI.59}$$

Tenemos además, por ejemplo, que

$$\left[\hat{P}, z_1\right] = [\hat{p}_1 + \hat{p}_2, x_1 - x_2] = 0, \tag{XVI.60}$$

etc.

b) En términos de las coordenadas normales, la ecuación de Schrödinger es

$$\left(\frac{\hat{P}^2}{2M}+\tfrac{1}{2}M\omega^2Z^2+\frac{\hat{p}_{z_1}^2}{2m_1}+\tfrac{1}{2}m_1\omega_1^2z_1^2+\frac{\hat{p}_{z_2}^2}{2m_2}+\tfrac{1}{2}m_2\omega_2^2z_2^2\right)\Psi\left(Z,z_1,z_2\right) = E\Psi\left(Z,z_1,z_2\right), \quad \text{(XVI.61)}$$

con las frecuencias ω_1 y ω_2 dadas por

$$\omega_1^2=\omega_2^2=\omega^2(1+3\beta). \quad \text{(XVI.62)}$$

Esta ecuación se separa factorizando las funciones de onda orbitales no simetrizadas en un producto de las funciones de onda de cada oscilador armónico unidimensional, es decir, escribiendo

$$\Psi\left(Z,z_1,z_2\right)=\psi_{n_1}\left(Z\right)\psi_{n_2}\left(z_1\right)\psi_{n_3}\left(z_2\right), \quad \text{(XVI.63)}$$

donde

$$Z=\tfrac{1}{3}(x_1+x_2+x_3); \quad z_1=x_1-x_2; \quad z_2=x_3-\tfrac{1}{2}(x_1+x_2); \quad \text{(XVI.64)}$$

$$\psi_{n_1}(Z)=\left(\sqrt{\frac{\pi\hbar}{M\omega}}2^{n_1}n_1!\right)^{-\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{M\omega Z^2}{2\hbar}\right)H_{n_1}\left(\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}Z\right), \quad \text{(XVI.65)}$$

$$\psi_{n_2}(z_1)=\left(\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m_1\omega_1}}2^{n_2}n_2!\right)^{-\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{m_1\omega_1 z_1^2}{2\hbar}\right)H_{n_2}\left(\sqrt{\frac{m_1\omega_1}{\hbar}}z_1\right), \quad \text{(XVI.66)}$$

$$\psi_{n_3}(z_2)=\left(\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m_2\omega_2}}2^{n_3}n_3!\right)^{-\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{m_2\omega_2 z_2^2}{2\hbar}\right)H_{n_3}\left(\sqrt{\frac{m_2\omega_2}{\hbar}}z_2\right). \quad \text{(XVI.67)}$$

c) A la función de onda (XVI.63) le corresponde la energía

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega\left(n_1+\tfrac{1}{2}\right)+\hbar\omega_1\left(n_2+\tfrac{1}{2}\right)+\hbar\omega_2\left(n_3+\tfrac{1}{2}\right) \\ &= \hbar\omega\left(n_1+\tfrac{1}{2}\right)+\hbar\omega_1(n_2+n_3+1), \quad n_1,n_2,n_3=0,1,2,\ldots \end{aligned} \quad \text{(XVI.68)}$$

d) Dado que el sistema está constituido por tres bosones de espín cero, su función de onda debe ser totalmente simétrica. Para construir esta función aplicamos a (XVI.63) los operadores de intercambio de parejas de partículas. De

$$\Psi\left(Z,z_1,z_2\right)=\psi_{n_1}\left(\tfrac{1}{3}\left(x_1+x_2+x_3\right)\right)\psi_{n_2}\left(x_1-x_2\right)\psi_{n_3}\left(x_3-\tfrac{1}{2}\left(x_1+x_2\right)\right)$$

sigue que

$$\hat{P}_{12}\Psi(Z,z_1,z_2)=\psi_{n_1}\left(\tfrac{1}{3}(x_1+x_2+x_3)\right)\psi_{n_2}(x_2-x_1)\psi_{n_3}\left(x_3-\tfrac{1}{2}(x_1+x_2)\right), \quad \text{(XVI.69)}$$

$$\hat{P}_{13}\Psi(Z,z_1,z_2)=\psi_{n_1}\left(\tfrac{1}{3}(x_1+x_2+x_3)\right)\psi_{n_2}(x_3-x_2)\psi_{n_3}\left(x_1-\tfrac{1}{2}(x_2+x_3)\right), \quad \text{(XVI.70)}$$

$$\hat{P}_{23}\Psi(Z,z_1,z_2)=\psi_{n_1}\left(\tfrac{1}{3}(x_1+x_2+x_3)\right)\psi_{n_2}(x_1-x_3)\psi_{n_3}\left(x_2-\tfrac{1}{2}(x_1+x_3)\right). \quad \text{(XVI.71)}$$

Vemos que:

i) La función $\psi_{n_1}(Z) = \psi_{n_1}\left(\frac{1}{3}(x_1+x_2+x_3)\right)$ permanece invariante ante todos los operadores de intercambio, por lo que el movimiento del centro de masa no desempeña ningún papel en la simetrización.

ii) El intercambio $1 \leftrightarrow 2$ produce el factor $(-1)^{n_2}$; como este factor no se puede compensar con ningún otro intercambio y la función de onda completa debe ser totalmente simétrica, no puede haber componentes con n_2 impar.

iii) Como el mero intercambio de las etiquetas que 'distinguen' partículas iguales no puede producir ningún efecto observable, las funciones (XVI.69)–(XVI.71) corresponden a un mismo valor de la energía, es decir, hay *degeneración de intercambio*. Sin embargo, estas funciones degeneradas no son necesariamente ortogonales entre sí, pues su argumento ha sido modificado por los operadores de intercambio, como se observa fácilmente escribiendo:

$$\hat{P}_{12}\Psi(Z,z_1,z_2) = \psi_{n_1}(Z)\psi_{n_2}(-z_1)\psi_{n_3}(z_2), \tag{XVI.72}$$

$$\hat{P}_{13}\Psi(Z,z_1,z_2) = \psi_{n_1}(Z)\psi_{n_2}\left(\tfrac{1}{2}z_1+z_2\right)\psi_{n_3}\left(\tfrac{3}{4}z_1-\tfrac{1}{2}z_2\right), \tag{XVI.73}$$

$$\hat{P}_{23}\Psi(Z,z_1,z_2) = \psi_{n_1}(Z)\psi_{n_2}\left(\tfrac{1}{2}z_1-z_2\right)\psi_{n_3}\left(-\tfrac{3}{4}z_1-\tfrac{1}{2}z_2\right) \tag{XVI.74}$$

La función de onda totalmente simétrica que describe el estado estacionario correspondiente a la energía (XVI.68) es, para números cuánticos arbitrarios,

$$\Psi = \tfrac{1}{\sqrt{6}}\left[\Psi(123)+\Psi(213)+\Psi(231)+\Psi(321)+\Psi(312)+\Psi(132)\right]. \tag{XVI.75}$$

Explícitamente,

$$\begin{aligned}\Psi \;=\; & \tfrac{1}{\sqrt{6}}\psi_{n_1}\left(\tfrac{1}{3}(x_1+x_2+x_3)\right)\Big\{\psi_{n_2}(x_1-x_2)\psi_{n_3}\left(x_3-\tfrac{1}{2}(x_1+x_2)\right)\\ & +\psi_{n_2}(x_2-x_1)\psi_{n_3}\left(x_3-\tfrac{1}{2}(x_1+x_2)\right)\\ & +\psi_{n_2}(x_2-x_3)\psi_{n_3}\left(x_1-\tfrac{1}{2}(x_2+x_3)\right)\\ & +\psi_{n_2}(x_3-x_2)\psi_{n_3}\left(x_1-\tfrac{1}{2}(x_2+x_3)\right)\\ & +\psi_{n_2}(x_3-x_1)\psi_{n_3}\left(x_2-\tfrac{1}{2}(x_1+x_3)\right)\\ & +\psi_{n_2}(x_1-x_3)\psi_{n_3}\left(x_2-\tfrac{1}{2}(x_1+x_3)\right)\Big\}.\end{aligned} \tag{XVI.76}$$

Sin embargo, n_2 debe ser par en todos los casos (para n_2 impar, los términos que aparecen en la expresión anterior se cancelan por parejas), por lo que ψ_{n_2} es una función par, y podemos poner $\psi_{n_2}(x_2-x_1) = \psi_{n_2}(x_1-x_2)$, etc., con lo que el número de términos diferentes se reduce a tres. Con esto, la función de onda totalmente simétrica resulta ser

$$\begin{aligned}\Psi \;=\; & \tfrac{1}{\sqrt{3}}\psi_{n_1}\left(\tfrac{1}{3}(x_1+x_2+x_3)\right)\Big\{\psi_{n_2}(x_1-x_2)\psi_{n_3}\left(x_3-\tfrac{1}{2}(x_1+x_2)\right)\\ & +\psi_{n_2}(x_2-x_3)\psi_{n_3}\left(x_1-\tfrac{1}{2}(x_2+x_3)\right)\\ & +\psi_{n_2}(x_1-x_3)\psi_{n_3}\left(x_2-\tfrac{1}{2}(x_1+x_3)\right)\Big\}.\end{aligned} \tag{XVI.77}$$

XVI.8 Resuelva el problema XIV.20 para el caso de dos partículas sin espín iguales, considerando el acoplamiento gaussiano como una perturbación pequeña. Compare los resultados.

En este problema se considera el caso particular en que los dos osciladores acoplados descritos por el hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_0} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_0} + \tfrac{1}{2}m_0\omega^2 x_1^2 + \tfrac{1}{2}m_0\omega^2 x_2^2 + V_0 \exp\left[-\frac{(x_1 - x_2)^2}{a^2}\right] \quad \text{(XVI.78)}$$

tienen masas (y no sólo frecuencias) iguales. El hamiltoniano no perturbado corresponde al de los dos osciladores independientes, por lo que las funciones de onda orbitales en ausencia de interacción son

$$\Psi(x_1, x_2) = \psi_n(x_1)\,\psi_m(x_2)\,, \quad \text{(XVI.79)}$$

con $\psi_n(x_1)$, $\psi_m(x_2)$ eigenfunciones de oscilador armónico. La energía propia correspondiente es

$$E^{(0)} = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(m + \tfrac{1}{2}\right) = \hbar\omega\,(n + m + 1)\,. \quad \text{(XVI.80)}$$

Por tratarse de dos bosones iguales, la función de onda debe ser simétrica, por lo que la solución (XVI.79) debe sustituirse por la expresión completa

$$\Psi(x_1, x_2) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_n(x_1)\,\psi_m(x_2) + \psi_m(x_1)\,\psi_n(x_2)\right]. \quad \text{(XVI.81)}$$

Como el potencial de interacción es simétrico, conmuta con el operador de intercambio $\hat{P}_{12}$, y la perturbación no mezcla estados con diferente simetría permutacional; debido a esto, y existiendo sólo soluciones simétricas, podemos tratar el problema como si no fuera degenerado. Por lo tanto, a primer orden de la teoría de perturbaciones la energía del sistema perturbado es

$$E = E^{(0)} + \left\langle \Psi \mid \hat{V} \mid \Psi \right\rangle, \quad \text{(XVI.82)}$$

con

$$\begin{aligned}\left\langle \Psi \mid \hat{V} \mid \Psi \right\rangle &= \tfrac{1}{2}\int \left[\psi_n^*(x_1)\psi_m^*(x_2) + \psi_m^*(x_1)\psi_n^*(x_2)\right] V \\ &\quad \times \left[\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) + \psi_m(x_1)\psi_n(x_2)\right]\, dx_1\, dx_2 = J + K, \quad \text{(XVI.83)}\end{aligned}$$

donde las cantidades J y K están dadas por las ecuaciones (XVI.21) y (XVI.22). Por lo tanto,

$$E = E^{(0)} + J + K. \quad \text{(XVI.84)}$$

Al considerar este sistema en el problema XIV.20, la función de onda que se utilizó fue la dada aquí por (XVI.79), por lo que la corrección que se obtuvo ahí corresponde exclusivamente a la dada por J. El término de intercambio (que puede ser comparable con J) simplemente no se tomó en cuenta, pues no se consideró la simetría de la solución. En otras palabras, la solución dada en el problema XIV.20 vale *sólo* para el caso de partículas diferentes, es decir, dado que ambas son de espín nulo, de masas diferentes $m_1 \neq m_2$.

XVI.9 Considere un sistema de cuatro osciladores armónicos desacoplados, iguales y colineales. Construya las funciones de onda y especifique los eigenvalores de la energía de los estados estacionarios físicamente realizables cuando:

a) las cuatro partículas son bosones de espín cero;

b) las cuatro partículas son fermiones de espín $1/2$.

La ecuación estacionaria de Schrödinger del problema es:

$$\left(\sum_{i=1}^{4}\frac{\hat{p}_i^2}{2m}+\sum_{i=1}^{4}\tfrac{1}{2}m\omega^2 x_i^2\right)\Psi\left(x_1,x_2,x_3,x_4\right)=E\Psi\left(x_1,x_2,x_3,x_4\right). \qquad \text{(XVI.85)}$$

Las funciones de onda orbitales solución de esta ecuación son el producto de cuatro funciones de onda de un oscilador armónico

$$\Psi_{klmn}\left(x_1,x_2,x_3,x_4\right)=\psi_k\left(x_1\right)\psi_l\left(x_2\right)\psi_m\left(x_3\right)\psi_n\left(x_4\right), \qquad \text{(XVI.86)}$$

con las $\psi_n(x_i)$ eigenfunciones de oscilador armónico similares a las dadas por la ecuación (XVI.46), y que corresponden a las energías

$$E_{klmn}=\hbar\omega\left(k+l+m+n+2\right), \quad k,l,m,n=0,1,2,\ldots \qquad \text{(XVI.87)}$$

A partir de estas soluciones se construyen las que describen bosones o fermiones, como se discute a continuación.

a) Cuando se trata de cuatro bosones de espín cero la función de onda es totalmente simétrica y se pueden presentar los siguientes casos:

i) $k=l=m=n$. La función (XVI.86) ya es simétrica, por lo que se tiene simplemente

$$\Psi^S\left(x_1,x_2,x_3,x_4\right)=\psi_n\left(x_1\right)\psi_n\left(x_2\right)\psi_n\left(x_3\right)\psi_n\left(x_4\right), \qquad \text{(XVI.88)}$$

y corresponde a la energía

$$E=2\hbar\omega\left(2n+1\right), \quad n=0,1,2,\ldots \qquad \text{(XVI.89)}$$

Estos estados no son degenerados, cualquiera que sea el valor de n; entre ellos se encuentra el estado base del sistema (con $n=0$).

ii) $k=l$, pero $n\neq l$ y $m\neq l$. La única función de onda totalmente simétrica es

$$\begin{aligned}\Psi^S \;=\; & \tfrac{1}{\sqrt{12}}\left(\Psi_{kkmn}+\Psi_{kknm}+\Psi_{kmkn}+\Psi_{kmnk}+\Psi_{knmk}+\Psi_{knkm}\right.\\ & \left.+\Psi_{nkkm}+\Psi_{nkmk}+\Psi_{nmkk}+\Psi_{mkkn}+\Psi_{mknk}+\Psi_{mnkk}\right)\end{aligned} \qquad \text{(XVI.90)}$$

y corresponde a la energía

$$E=\hbar\omega\left(2k+m+n+2\right), \quad k,m,n=0,1,2,\ldots \qquad \text{(XVI.91)}$$

iii) $k=l=m\neq n$. El único estado realizable es

$$\Psi^S=\tfrac{1}{\sqrt{4}}\left(\Psi_{kkkn}+\Psi_{kknk}+\Psi_{knkk}+\Psi_{knnk}\right) \qquad \text{(XVI.92)}$$

y corresponde a la energía

$$E=\hbar\omega\left(3k+n+2\right), \quad k,n=0,1,2,\ldots \qquad \text{(XVI.93)}$$

iv) $k = l$ y $m = n$. El único estado realizable es

$$\Psi^S = \tfrac{1}{\sqrt{6}} \left(\Psi_{nkkn} + \Psi_{nknk} + \Psi_{nnkk} + \Psi_{kknn} + \Psi_{knkn} + \Psi_{nkkk}\right) \quad \text{(XVI.94)}$$

y corresponde a la energía

$$E = 2\hbar\omega \left(k + n + 1\right), \quad k, n = 0, 1, 2, \ldots \quad \text{(XVI.95)}$$

v) k, l, m, n todas diferentes. El único estado realizable es

$$\begin{aligned} \Psi^S \;=\; & \tfrac{1}{\sqrt{24}} \Big(\Psi_{klmn} + \Psi_{kl\,nm} + \Psi_{kmln} + \Psi_{kmnl} + \Psi_{knml} + \Psi_{knlm} \\ & + \Psi_{lkmn} + \Psi_{l\,knm} + \Psi_{lmkn} + \Psi_{lmnk} + \Psi_{l\,nkm} + \Psi_{l\,nmk} \\ & + \Psi_{nklm} + \Psi_{nkml} + \Psi_{nlkm} + \Psi_{nlmk} + \Psi_{nmlk} + \Psi_{nmkl} \\ & + \Psi_{mkl\,n} + \Psi_{mknl} + \Psi_{mlkn} + \Psi_{ml\,nk} + \Psi_{mnkl} + \Psi_{mnlk} \Big) \end{aligned} \quad \text{(XVI.96)}$$

y corresponde a la energía

$$E = \hbar\omega(k + l + m + n + 2). \quad \text{(XVI.97)}$$

b) Cuando se trata de cuatro fermiones de espín $1/2$ debe optarse por las soluciones totalmente antisimétricas, incluyendo, además de las coordenadas espaciales x_i, la coordenada espinorial, conjunto de variables que venimos denotando con ξ_i. Como para hamiltonianos que no dependen del espín, como es el presente caso, las funciones de onda de una partícula se reducen al producto de la función espinorial $\chi_\pm$ por la función orbital $\psi_n(x_i)$, se puede escribir alternativamente

$$\psi_n^\pm \left(x_i\right) \equiv \psi_n \left(\xi_i\right) = \psi_n \left(x_i\right) \chi_\pm. \quad \text{(XVI.98)}$$

La orientación del espín $\pm$ de cada una de las cuatro partículas la denotaremos con a, b, c, d, por lo que la función de onda no simetrizada que reemplaza a la (XVI.86) la podemos escribir en la forma sintética

$$\Psi_{klmn}^{abcd} = \psi_k^a \left(x_1\right) \psi_l^b \left(x_2\right) \psi_m^c \left(x_3\right) \psi_n^d \left(x_4\right). \quad \text{(XVI.99)}$$

La función de onda totalmente antisimétrica construída a partir de esta base está dada por el determinante de Slater

$$\left(\Psi_{klmn}^{abcd}\right)^A = \tfrac{1}{\sqrt{24}} \begin{vmatrix} \psi_k^a \left(x_1\right) & \psi_k^a \left(x_2\right) & \psi_k^a \left(x_3\right) & \psi_k^a \left(x_4\right) \\ \psi_l^b \left(x_1\right) & \psi_l^b \left(x_2\right) & \psi_l^b \left(x_3\right) & \psi_l^b \left(x_4\right) \\ \psi_m^c \left(x_1\right) & \psi_m^c \left(x_2\right) & \psi_m^c \left(x_3\right) & \psi_m^c \left(x_4\right) \\ \psi_n^d \left(x_1\right) & \psi_n^d \left(x_2\right) & \psi_n^d \left(x_3\right) & \psi_n^d \left(x_4\right) \end{vmatrix}. \quad \text{(XVI.100)}$$

Desarrollando, la expresión explícita resulta

$$\begin{aligned} \left(\Psi_{klmn}^{abcd}\right)^A \;=\; & \tfrac{1}{\sqrt{24}} \Big(\Psi_{klmn}^{abcd} - \Psi_{kl\,nm}^{abdc} - \Psi_{kml\,n}^{acbd} + \Psi_{knlm}^{adbc} + \Psi_{kmnl}^{acdb} - \Psi_{knml}^{adcb} \\ & - \Psi_{lkmn}^{bacd} + \Psi_{lknm}^{badc} + \Psi_{mkl\,n}^{cabd} - \Psi_{nklm}^{dabc} - \Psi_{mknl}^{cadb} + \Psi_{nkml}^{dacb} \\ & + \Psi_{lmkn}^{bcad} - \Psi_{l\,nkm}^{bdac} - \Psi_{mlkn}^{cbad} + \Psi_{nlkm}^{dbac} + \Psi_{mnkl}^{cdab} - \Psi_{nmkl}^{dcab} \\ & - \Psi_{lmnk}^{bcda} + \Psi_{l\,nmk}^{bdca} + \Psi_{ml\,nk}^{cbda} - \Psi_{nlmk}^{dbca} - \Psi_{mnlk}^{cdba} + \Psi_{nmlk}^{dcba} \Big). \end{aligned} \quad \text{(XVI.101)}$$

Sin embargo, mientras los números cuánticos k, l, m, n, pueden ser iguales o diferentes, los números cuánticos espinoriales, a, b, c, d, no pueden ser todos diferentes, ya que sólo pueden tomar uno de los valores + ó −. Esto reduce las posibilidades a los siguientes casos:

i) $l = n = m = k$. Como necesariamente habrá índices espinoriales iguales, el determinante de Slater posee al menos dos hileras iguales y se anula. Esto significa que este estado no se realiza.

ii) $k = l = m \neq n$. Vale la misma consideración del caso anterior, pues aquí también al menos dos de los índices a, b, c, d tienen que ser iguales.

iii) $k = l \neq m = n$. Para que el determinante de Slater sea diferente de cero deberá cumplirse que $a \neq b$, $c \neq d$. Sigue que los siguientes cuatro estados son realizables:

$$(abcd) = (+-+-)\,,(-++-)\,,(+--+)\,,(-+-+)\,. \qquad \text{(XVI.102)}$$

A estos estados les corresponde la energía

$$E = 2\hbar\omega\,(n+k+1)\,, \quad k,n = 0,1,2,\ldots,n \neq k. \qquad \text{(XVI.103)}$$

Entre estos estados se encuentran los de mínima energía, con $k = 0$, $n = 1$, o bien, $k = 1$, $n = 0$; por lo tanto, en este caso el estado base es degenerado y su energía es mayor que la del correspondiente estado base de cuatro bosones similares.

Como ejemplo, uno de estos cuatro estados realizables es

$$\begin{aligned}\left(\Psi^{+-+-}_{kknn}\right)^A \;=\; & \tfrac{1}{\sqrt{24}}\Big(\Psi^{+-+-}_{kknn} - \Psi^{+--+}_{kk\,nn} - \Psi^{++-\,-}_{knk\,n} + \Psi^{+--+}_{knkn} + \Psi^{++-\,-}_{knnk} \\ & - \Psi^{+-+-}_{knnk} - \Psi^{-++-}_{kknn} + \Psi^{-+-+}_{kknn} + \Psi^{++-\,-}_{nkk\,n} - \Psi^{-+-+}_{nkkn} \\ & - \Psi^{++-\,-}_{nknk} + \Psi^{-++-}_{nknk} + \Psi^{-++-}_{knkn} - \Psi^{--++}_{k\,nkn} - \Psi^{+-+-}_{nkkn} \\ & + \Psi^{--++}_{nkkn} + \Psi^{+-+-}_{nnkk} - \Psi^{-++-}_{nnkk} - \Psi^{-+-+}_{knnk} + \Psi^{--++}_{k\,nnk} \\ & + \Psi^{+--+}_{nk\,nk} - \Psi^{--++}_{nknk} - \Psi^{+--+}_{nnkk} + \Psi^{-+-+}_{nnkk}\Big). \qquad \text{(XVI.104)}\end{aligned}$$

iv) $k = l$, pero $m, n \neq l$, $m \neq n$. En este caso a y b deben ser distintos, pero c y d pueden tomar cualquier valor. Existen 8 estados realizables, caracterizados por

$$\begin{aligned}(abcd) \;=\; & (+-++),(+--\,-),(+-+-),(+--+), \\ & (-++\,+),(-+-\,-),(-++-),(-+-+) \qquad \text{(XVI.105)}\end{aligned}$$

y les corresponde la energía

$$E = \hbar\omega(2k+m+n+2), \quad k,m,n = 0,1,2,\ldots \qquad \text{(XVI.106)}$$

Un ejemplo de estos estados es

$$\begin{aligned}\left(\Psi^{+-++}_{kkmn}\right)^A &= \tfrac{1}{\sqrt{24}}\Big(\Psi^{+-++}_{kkmn}-\Psi^{+-++}_{kk\,nm}-\Psi^{++-+}_{kmk\,n}+\Psi^{++-+}_{knkm}+\Psi^{+++-}_{kmnk}\\ &\quad -\Psi^{+++-}_{knmk}-\Psi^{-+++}_{kkmn}+\Psi^{-+++}_{kknm}+\Psi^{++-+}_{mkk\,n}-\Psi^{++-+}_{nkkm}\\ &\quad -\Psi^{+++-}_{mknk}+\Psi^{+++-}_{nkmk}+\Psi^{-+++}_{kmkn}-\Psi^{-+++}_{k\,nkm}-\Psi^{+-++}_{mkkn}\\ &\quad +\Psi^{+-++}_{nkkm}+\Psi^{+++-}_{mnkk}-\Psi^{+++-}_{nmkk}-\Psi^{-+++}_{kmnk}+\Psi^{-+++}_{k\,nmk}\\ &\quad +\Psi^{+-++}_{mk\,nk}-\Psi^{+-++}_{nkmk}-\Psi^{++-+}_{mnkk}+\Psi^{++-+}_{nmkk}\Big). \qquad \text{(XVI.107)}\end{aligned}$$

v) k, l, m, n diferentes. Todas las posibles combinaciones de los índices espinoriales son aceptables, por lo que existen 2^4 estados de espín realizables. Entre estos estados los hay con simetría definida respecto al intercambio de coordenadas espaciales o espinoriales por separado. La energía de estos estados es

$$E = \hbar\omega\,(k+l+m+n+2)\,. \qquad \text{(XVI.108)}$$

Estos 16 estados realizables corresponden a

$$\begin{aligned}(abcd) &= (++++),(-+++),(+-++),(++-+),(+++-),\\ &\quad (+---),(-+--),(--+-),(---+),(++--),\\ &\quad (--++),(-+\,+-),(+--+),(-+\,-+),(+-\,+-),\\ &\quad (----). \qquad \text{(XVI.109)}\end{aligned}$$

Por ejemplo, uno de estos estados es

$$\begin{aligned}\left(\Psi^{++++}_{klmn}\right)^A &= \tfrac{1}{\sqrt{24}}\Big(\Psi^{++++}_{klmn}-\Psi^{++++}_{klnm}-\Psi^{++++}_{kmln}+\Psi^{++++}_{knlm}+\Psi^{++++}_{kmnl}\\ &\quad -\Psi^{++++}_{knml}-\Psi^{++++}_{lkmn}+\Psi^{++++}_{lknm}+\Psi^{++++}_{mkln}-\Psi^{++++}_{nklm}\\ &\quad -\Psi^{++++}_{mknl}+\Psi^{++++}_{nkml}+\Psi^{++++}_{lmkn}-\Psi^{++++}_{lnkm}-\Psi^{++++}_{mlkn}\\ &\quad +\Psi^{++++}_{nlkm}+\Psi^{++++}_{mnkl}-\Psi^{++++}_{nmkl}-\Psi^{++++}_{lmnk}+\Psi^{++++}_{lnmk}\\ &\quad +\Psi^{++++}_{mlnk}-\Psi^{++++}_{nlmk}-\Psi^{++++}_{mnlk}+\Psi^{++++}_{nmlk}\Big). \qquad \text{(XVI.110)}\end{aligned}$$

Los estados de máximo espín pertenecen a esta categoría, cuya mínima energía es muy alta ($E_{\text{mín}} = 8\hbar\omega$), y de la que quedan excluídos un gran número de posibles estados orbitales por la restricción de que los cuatro números cuánticos k, l, m, n tienen que ser diferentes.

El ejemplo muestra una vez más el impacto de la presencia del espín electrónico sobre el espectro de energía, aun en ausencia de cualquier acoplamiento directo del espín al resto del sistema.

XVI.2. Problemas adicionales

XVI.10 Un sistema de dos electrones sin interacción mutua se encuentra confinado dentro de un cubo impenetrable de lado $2L$, centrado en el origen. Determine la energía del estado base para el singlete y el triplete de espín.

La función de onda de cada partícula por separado se puede escribir para el interior del cubo en la forma

$$\psi_{n_1n_2n_3}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \operatorname{sen}\frac{\pi n_1}{2L}(x+L) \operatorname{sen}\frac{\pi n_2}{2L}(y+L) \operatorname{sen}\frac{\pi n_3}{2L}(z+L), \quad \text{(XVI.111)}$$

con n_i números enteros positivos; en el exterior ψ es nula. La energía individual correspondiente es

$$E_{n_1n_2n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{8m_0L^2}\left(n_1^2+n_2^2+n_3^2\right). \quad \text{(XVI.112)}$$

Cuando los espines son paralelos (triplete), el factor espinorial de la función de onda es simétrico y la antisimetría de la función de onda total se obtiene con un factor orbital antisimétrico. Los estados de menor energía tienen la forma típica

$$\Psi_1 = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{111}(\mathbf{r}_1)\psi_{211}(\mathbf{r}_2) - \psi_{211}(\mathbf{r}_1)\psi_{111}(\mathbf{r}_2)\right]|\uparrow\uparrow\rangle\,. \quad \text{(XVI.113)}$$

El grado de degeneración de estos niveles es 3 y su energía es

$$E_{1\text{mín}} = \frac{\pi^2\hbar^2}{8m_0L^2}(3+6) = \frac{9\pi^2\hbar^2}{8m_0L^2}. \quad \text{(XVI.114)}$$

En el caso del singulete con espines antiparalelos el factor espinorial es antisimétrico, por lo que la función orbital debe ser simétrica. Esto permite que el estado de menor energía se dé con todas las $n_i = 1$, es decir,

$$\Psi_0 = \psi_{111}(\mathbf{r}_1)\psi_{111}(\mathbf{r}_2)\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right]. \quad \text{(XVI.115)}$$

El estado es no degenerado y tiene la energía total

$$E_{0\text{mín}} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{4m_0L^2}. \quad \text{(XVI.116)}$$

XVI.11 Un sistema de tres electrones constreñidos a un movimiento unidimensional posee el hamiltoniano

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_3^2}\right) - \frac{g^2}{(x_1^2+x_2^2+x_3^2)^{1/2}}.$$

Determine la función de onda y la energía del estado base.

El hamiltoniano tiene la misma forma que la que describe un átomo hidrogenoide, por lo que es posible escribir de inmediato las funciones de onda orbitales y correspondientes energías para los primeros niveles del sistema de tres partículas. En particular, escribiendo formalmente $r = (x_1^2+x_2^2+x_3^2)^{1/2}$, $a_0 = \hbar^2/m_0g^2$, se obtiene:

a) Para el estado individual de menor energía,

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}, \quad E_1 = -\frac{m_0g^4}{2\hbar^2}. \quad \text{(XVI.117)}$$

b) Para el primer estado excitado,

$$\psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/2a_0}, \quad \text{(XVI.118)}$$

$$\psi_{21i} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}}\frac{x_i}{2a_0}e^{-r/2a_0}, \quad i = 1,2,3. \quad \text{(XVI.119)}$$

A estos cuatro estados degenerados corresponde la energía propia

$$E_2 = -\frac{m_0 g^4}{8\hbar^2}. \tag{XVI.120}$$

Los estados ψ_{21i} son combinaciones lineales de las funciones de onda ψ_{21m} del hidrógeno ($m = -1, 0, 1$), seleccionadas para separar apropiadamente las funciones que corresponden a cada una de las tres variables independientes x_i.

Las soluciones orbitales $\psi_{100}(x_1, x_2, x_3)$ y $\psi_{200}(x_1, x_2, x_3)$ son simétricas respecto a las tres coordenadas x_1, x_2, x_3, por lo que deben multiplicarse por un factor espinorial totalmente antisimétrico para obtener la función de onda total debidamente antisimetrizada. Pero tal factor no existe para tres espines $1/2$, pues al menos dos de ellos son iguales, lo que implica simetría, no antisimetría, respecto de ellos. Esto significa que ninguno de estos estados s es físicamente realizable en condiciones estacionarias y que sólo existen soluciones estacionarias para los estados orbitales p, descritos por combinaciones lineales de las funciones ψ_{21i}. Como cada una de estas funciones es simétrica respecto de las dos $x_j \neq x_i$ restantes, el correspondiente factor espinorial debe ser antisimétrico para esa pareja de partículas. Por ejemplo, para espín total $+1/2$ se puede escribir[1]

$$\Psi_{21}^{(+)} = \frac{1}{8\sqrt{3\pi a_0^5}} e^{-r/2a_0} \Big\{ x_1 \left[|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle\right] + x_2 \left[|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle\right] + x_3 \left[|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle\right] \Big\}. \tag{XVI.121}$$

Tomando en cuenta el espín, el grado de degeneración de estas soluciones es dos. Estados de espín $3/2$ sólo pueden ocurrir para mayores excitaciones.

XVI.12 Demuestre que para un sistema de dos partículas iguales de espín s, la razón entre los números de estados simétricos y antisimétricos es $(s+1)/s$.

Denotemos por χ_i, con $i = -s, -s+1, \ldots, s$, a uno de los $2s+1$ eigenestados de espín posibles de una partícula de espín s. Una base para el espacio de espín total del sistema de dos partículas con el mismo espín está dada por vectores de la forma $\chi_i(1)\chi_k(2)$, con $i, k = -s, -s+1, \ldots, s$; esta base posee $(2s+1)^2$ elementos independientes. Los vectores obtenidos de esta forma no tienen obviamente una simetría definida bajo permutaciones de los espines; sin embargo, la clasificación en estados simétricos y antisimétricos se puede obtener de manera simple, como sigue.

Para $i = k$ hay $2s+1$ vectores simétricos de la forma $\chi_i(1)\chi_i(2)$. Para $i \neq k$ podemos construir $2s(2s+1)$ combinaciones simétricas o antisimétricas de la forma

$$\chi_i(1)\,\chi_k(2) \pm \chi_k(1)\,\chi_i(2). \tag{XVI.122}$$

Como $2s(2s+1)+(2s+1) = (2s+1)^2$, los estados anteriores constituyen una base completa con simetría permutacional bien definida. De este análisis sigue que la razón entre el número de estados simétricos y el número de estados antisimétricos es

$$\frac{s(2s+1)+(2s+1)}{s(2s+1)} = \frac{s+1}{s}. \tag{XVI.123}$$

XVI.13 Demuestre que si la función de onda de un sistema de dos partículas idénticas sin espín es eigenfunción del momento angular orbital del movimiento

[1] Mayores detalles pueden verse en Galindo y Pascual (1989), p. 508.

relativo de las dos partículas, entonces el número cuántico l necesariamente es par, incluyendo posiblemente cero.

Denotemos con $\mathbf{r}_1$ y $\mathbf{r}_2$ la posición de cada una de las dos partículas. Pasando a un sistema de referencia con origen en el punto $(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$, la operación de inversión de coordenadas se reduce a la permutación de las dos partículas. Por otra parte, de la expresión (T12.55),

$$\hat{P}Y_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^l Y_l^m(\theta,\varphi), \tag{XVI.124}$$

sabemos que los armónicos esféricos poseen paridad bien definida, que es precisamente la del momento angular orbital l. De estas consideraciones sigue que la función de onda que describe el movimiento orbital relativo resulta multiplicada por el factor $(-1)^l$ cuando se permutan las partículas. Ahora bien, ya que en el presente caso se trata de bosones de espín cero, la función de onda depende sólo de las coordenadas de posición de las dos partículas y, como debe ser par ante la permutación de éstas, l debe ser cero o par.

XVI.14 Considere un sistema de dos partículas, que pueden ser iguales o no, pero con espacios de Hilbert isométricos. Los observables de la partícula 1 los denotamos con $\hat{F}(1)$, una vez que han sido extendidos al espacio de Hilbert del sistema: $\hat{F}_1 \to \hat{F}(1) = \hat{F}_1 \otimes \mathbb{I}_2$ (como se explica en la sección 10.2 del texto). Una extensión análoga se hace con los observables de la partícula 2, $\hat{F}_2 \to \hat{F}(2) = \mathbb{I}_1 \otimes \hat{F}_2$. Demuestre que, si $\hat{P}_{21}$ es el operador de intercambio de las dos partículas, se cumple que

$$\hat{P}_{21}\hat{F}(1) = \hat{F}(2)\hat{P}_{21},$$

y que, si $\hat{S}(1,2)$ es un operador simétrico respecto a esta operación, conmuta con el operador de intercambio,

$$[\hat{S}(1,2), \hat{P}_{21}] = 0.$$

Como base podemos usar los vectores construidos a partir de los vectores propios de $\hat{F}(1)$; denotando estos eigenestados en $\mathcal{H}_1$ con $|i\rangle_1$ y los eigenvalores con f_i, los estados (no simetrizados) en el espacio de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ los denotaremos con

$$|1(i);2(j)\rangle \equiv |i\rangle_1 |j\rangle_2 . \tag{XVI.125}$$

Tenemos

$$\begin{aligned} \hat{P}_{21}\hat{F}(1)\hat{P}_{21}^\dagger |1(i);2(j)\rangle &= \hat{P}_{21}\hat{F}(1)\hat{P}_{21} |1(i);2(j)\rangle \\ &= \hat{P}_{21}\hat{F}(1) |1(j);2(i)\rangle \\ &= f_j \hat{P}_{21} |1(j);2(i)\rangle = f_j |1(i);2(j)\rangle . \end{aligned} \tag{XVI.126}$$

Por otro lado, es inmediato que el resultado final también se puede obtener como

$$\hat{F}(2) |1(i);2(j)\rangle = f_j |1(i);2(j)\rangle . \tag{XVI.127}$$

Como $|1(i);2(j)\rangle$ es arbitrario, de esta igualdad sigue que

$$\hat{P}_{21}\hat{F}(1)\hat{P}_{21}^\dagger = \hat{F}(2), \tag{XVI.128}$$

lo que, tomando en cuenta que $\hat{P}_{21}^\dagger = \hat{P}_{21}$ y que $\hat{P}_{21}^2 = 1$, resulta equivalente a

$$\hat{P}_{21}\hat{F}(1) = \hat{F}(2)\hat{P}_{21}, \tag{XVI.129}$$

que es una de las propiedades que se solicita demostrar. Este resultado debe ser intuitivamente claro, como también

$$\hat{P}_{21}\hat{F}(2) = \hat{F}(1)\hat{P}_{21}. \tag{XVI.130}$$

El procedimiento se puede generalizar y se obtiene, para cualquier operador $\hat{G}(1,2)$,

$$\hat{P}_{21}\hat{G}(1,2) = \hat{G}(2,1)\hat{P}_{21}. \tag{XVI.131}$$

El operador $\hat{G}$ siempre se puede separar en una parte simétrica y otra antisimétrica, en la forma

$$\begin{aligned}\hat{G}(1,2) &= \tfrac{1}{2}\left(\hat{G}(1,2)+\hat{G}(2,1)\right)+\tfrac{1}{2}\left(\hat{G}(1,2)-\hat{G}(2,1)\right)\\ &= \hat{G}^S(1,2)+\hat{G}^A(1,2).\end{aligned} \tag{XVI.132}$$

De (XVI.131) sigue que

$$\hat{P}_{21}\hat{G}^S(1,2) = \hat{G}^S(1,2)\hat{P}_{21}, \quad \hat{P}_{21}\hat{G}^A(1,2) = -\hat{G}(1,2)\hat{P}_{21}. \tag{XVI.133}$$

Estos resultados se pueden reexpresar de manera equivalente en términos de un conmutador o un anticonmutador:

$$\left[\hat{P}_{21}, \hat{G}^S(1,2)\right] = 0, \quad \left\{\hat{P}_{21}, \hat{G}^A(1,2)\right\} = 0. \tag{XVI.134}$$

La primera de estas expresiones equivale al otro resultado solicitado. En el caso de partículas iguales se tiene además que $\hat{G}(1,2)$ debe conmutar con el operador de permutación; de esta observación se concluye que los observables físicos de sistemas de partículas iguales son simétricos frente a las permutaciones de las partículas.

XVI.3. Ejercicios

XVI.15 Considere un sistema de tres partículas de espín igual (aunque las partículas podrían no ser iguales) y el conjunto de los 6 operadores de permutación $\hat{P}_{ijk}$ (donde i, j, k son diferentes y toman los valores 1,2,3). Demuestre que: a) $\hat{P}_{ijk}$ no conmuta con otro de estos operadores; b) existe una inversa para cada uno de ellos, y determínela; c) forman un grupo (el *grupo de permutaciones* de tres elementos); d) algunos (¿cuáles?) de estos operadores son meramente operadores de transposición o intercambio de dos partículas; e) todos los operadores $\hat{P}_{ijk}$ se pueden expresar como el producto (no unívoco) de operadores de intercambio.

XVI.16 Determine los niveles de energía y su orden de degeneración (en el espacio orbital) para los sistemas discutidos en el problema XVI.4.

XVI.17 Sea $\hat{P}_\alpha$ una permutación de los N primeros enteros y considere los operadores

$$\hat{S} = \frac{1}{N!}\sum_\alpha \hat{P}_\alpha,$$

$$\hat{A} = \frac{1}{N!}\sum_\alpha \varepsilon_\alpha \hat{P}_\alpha, \quad \begin{cases} \varepsilon_\alpha = +1 & \text{si} \hat{P}_\alpha \text{ es una permutación par} \\ \varepsilon_\alpha = -1 & \text{si} \hat{P}_\alpha \text{ es una permutación impar,} \end{cases}$$

donde la suma se realiza sobre las $N!$ permutaciones de los primeros N enteros. Demuestre que los operadores $\hat{S}$ y $\hat{A}$ son ambos hermitianos, idempotentes y mutuamente ortogonales; además, que conmutan con cualquier $\hat{P}_\beta$. Por lo tanto, ambos son proyectores. ¿Sobre qué subespacios proyectan? Utilice estos operadores para expresar la función de onda de un sistema de N bosones o N fermiones iguales.

XVI.18 El deuterón (constituido por un protón y un neutrón) tiene espín 1. Detalle los posibles estados de espín y de momento angular total de un sistema de dos deuterones en un estado de momento angular L.

XVI.19 Considere dos partículas de espín $1/2$ y sea $\hat{\mathbf{n}}$ el vector unitario que las conecta. Muestre que el operador

$$\hat{S}_{12} = 3\,(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}})\,(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}}) - \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$$

satisface las ecuaciones

$$\hat{S}_{12}\chi_{\text{singulete}} = 0, \quad (\hat{S}_{12} - 2)(\hat{S}_{12} + 4)\chi_{\text{triplete}} = 0.$$

XVI.20 Tres partículas de espín cero están rígidamente unidas para formar un triángulo equilátero que gira sobre una circunferencia de radio r. Determine los niveles rotacionales de este sistema.

XVI.21 Considere un sistema de $2N$ partículas idénticas. Demuestre que existen $N(2N+1)$ operadores de intercambio independientes, y que solamente N de ellos conmutan entre sí. Exhiba un conjunto completo de estos operadores mutuamente conmutativos.

XVI.22 Demuestre que si la interacción de dos partículas es local e independiente del espín, de tal forma que

$$\left\langle\, \mathbf{r}^1\sigma^1, \mathbf{r}^2\sigma^2 \mid \hat{V} \mid \mathbf{r}^3\sigma^3, \mathbf{r}^4\sigma^4 \,\right\rangle = V\left(\mathbf{r}^1, \mathbf{r}^2\right)\delta\left(\mathbf{r}^1 - \mathbf{r}^4\right)\delta\left(\mathbf{r}^2 - \mathbf{r}^3\right)\delta_{\sigma^1\sigma^4}\delta_{\sigma^2\sigma^3},$$

entonces se puede escribir para un estado de n partículas

$$\langle \Psi \mid V \mid \Psi \rangle = \sum_{i>j=1}^{n} \sum_{\sigma_1,\sigma_2\cdots} \int |\psi\,(\mathbf{r}_1\sigma_1, \ldots, \mathbf{r}_n\sigma_n)|^2\, V\,(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)\, d^3r_1 \cdots d^3r_n.$$

XVI.23 Realice este ejercicio:

a) Sin tomar en cuenta la simetrización pero incluyendo la degeneración de intercambio, determine la degeneración de los cuatro estados más bajos para el problema XVI.7.

b) Lo mismo que en el inciso (a) pero considerando a las partículas como bosones de espín cero.

c) Lo mismo que en el inciso (a) pero considerando a las partículas como fermiones de espín $1/2$.

XVI.24 Demuestre que si una funcion de onda $\Psi(1, 2, \ldots, n)$ es eigenfunción de un hamiltoniano simétrico y corresponde a un eigenvalor no degenerado, es simétrica o antisimétrica.

XVI.25 Demuestre que la función Ψ^A antisimétrica dada por la ecuación (T16.26) se anula si hay una relación lineal idéntica entre las funciones ψ_{n_1}, ψ_{n_2}, ..., ψ_{n_N}.

XVI.26 Demuestre que todas las eigenfunciones que corresponden al máximo valor de $\hat{S}^2$ de un sistema de N electrones son simétricas en las coordenadas espinoriales de los electrones individuales.

XVI.27 Sea $\hat{F}$ un operador de la forma

$$\hat{F}(1,2,\ldots,N) = \hat{f}(1) + \hat{f}(2) + \cdots + \hat{f}(N) = \sum_{i=1}^{N} \hat{f}(i),$$

donde $\hat{f}(i)$ opera sólo sobre las coordenadas de la i-ésima partícula en un sistema de N partículas idénticas. Demuestre que

$$\left\langle \Psi^A \mid \hat{F} \mid \Psi^A \right\rangle = \sum_{i=1}^{N} \left\langle \psi_i \mid \hat{f}(i) \mid \psi_i \right\rangle,$$

donde Ψ^A es la función de onda antisimétrica (T16.26) y las funciones de onda ψ_i de una partícula son ortonormales.

XVII. Métodos aproximados III: Absorción y emisión de radiación

XVII.1. Problemas del texto

XVII.1 ¿Qué relación existe entre el método variacional y la teoría de perturbaciones independientes del tiempo?

Si las funciones de prueba que se utilizan en el método variacional coinciden con las eigenfunciones del hamiltoniano no perturbado, los niveles de energía obtenidos a través del método variacional son idénticos a los que arroja la teoría de perturbaciones a primer orden.

XVII.2 Para resolver el problema del oscilador armónico con el método variacional, se proponen las siguientes funciones de prueba:

a) $A_0 e^{-\alpha x^2}$, para el estado base;

b) $A_1 x e^{-\alpha x^2}$, para el primer estado excitado;

c) $A_2 \left(1 + bx^2\right) e^{-\alpha x^2}$, para el segundo estado excitado.

Justifique esta selección y determine las funciones de onda y los eigenvalores de la energía para los tres primeros estados.

Las características básicas de la función de onda del estado base del oscilador armónico son: se anula exponencialmente cuando $|x| \to \infty$ es par y no posee nodos. La función de prueba propuesta,

$$\psi(x) = A_0 e^{-\alpha x^2}, \tag{XVII.1}$$

posee estas propiedades. Las funciones propuestas para los estados excitados se anulan en el infinito, cada una de ellas tiene un nodo adicional respecto a la del estado anterior, alternan su paridad y sus coeficientes pueden seleccionarse para garantizar que cada una sea ortogonal a las otras dos funciones. A lo anterior se puede agregar la simplicidad de las tres funciones propuestas. Por todas estas propiedades, son excelentes funciones de prueba para investigar los primeros tres estados del oscilador.

En cada caso las constantes A_i (que tomaremos reales y positivas) se determinan de la condición de normalización. Para el estado base se obtiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)\,dx = A_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = A_0^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = 1, \tag{XVII.2}$$

lo que da

$$\psi\left(x\right) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2}. \tag{XVII.3}$$

La constante α se fija con el procedimiento variacional para que la función de prueba minimice la energía. El valor esperado de $\hat{H}$ para el estado base, calculado con esta función de prueba, es

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{H} \right\rangle &= A_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) e^{-\alpha x^2} dx \\ &= A_0^2 \left[\frac{\alpha\hbar^2}{m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx + \left(\tfrac{1}{2}m\omega^2 - \frac{2\alpha^2\hbar^2}{m} \right) \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx \right], \\ \left\langle \hat{H} \right\rangle &= \frac{\alpha\hbar^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{8\alpha}. \end{aligned} \tag{XVII.4}$$

Para minimizar este valor respecto al parámetro α se impone la condición

$$\frac{d\left\langle \hat{H} \right\rangle}{d\alpha} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8\alpha^2} = 0,$$

de donde se obtiene

$$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}. \tag{XVII.5}$$

Como

$$\left.\frac{d^2\left\langle \hat{H} \right\rangle}{d\alpha^2}\right|_{\alpha=m\omega/2\hbar} = \left.\frac{m\omega^2}{4\alpha^3}\right|_{\alpha=m\omega/2\hbar} = \frac{2\hbar^3}{m^2\omega} > 0, \tag{XVII.6}$$

se trata efectivamente de un mínimo, cuyo valor es

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\text{mín}} = \left\langle \hat{H}\left(\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}\right) \right\rangle = \tfrac{1}{2}\hbar\omega. \tag{XVII.7}$$

De aquí sigue, para la energía del estado base del oscilador armónico, que

$$E_0 \leq \left\langle \hat{H} \right\rangle_{\text{mín}} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega. \tag{XVII.8}$$

La cota que se obtiene tomando el signo de igualdad coincide con el valor exacto de la energía del estado base; esto se debe a que la función de prueba con el valor de α dado por (XVII.5) coincide a su vez con la solución exacta del problema,

$$\psi_0\left(x\right) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right). \tag{XVII.9}$$

Para el primer estado excitado se propone la función de prueba

$$\psi_1\left(x\right) = A_1 x e^{-\alpha x^2}. \tag{XVII.10}$$

Esta función es ortogonal a $\psi_0(x)$, pues

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x)\,\psi_0(x)\,dx \propto \int_{-\infty}^{\infty} xe^{-2\alpha x^2}dx = 0. \tag{XVII.11}$$

De la condición de normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x)\,\psi_1(x)\,dx = A_1^2\int_{-\infty}^{\infty} x^2e^{-2\alpha x^2}dx = A_1^2\frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha^3}} = 1$$

sigue que

$$A_1 = 2\left(\frac{2\alpha^3}{\pi}\right)^{1/4}. \tag{XVII.12}$$

El valor esperado de $\hat{H}$ calculado con la función de prueba $\psi_1(x)$ es

$$\begin{aligned}
\left\langle \hat{H} \right\rangle &= A_1^2\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-\alpha x^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2\right)xe^{-\alpha x^2}dx \\
&= A_1^2\left[\frac{3\alpha\hbar^2}{m}\int_{-\infty}^{\infty} x^2e^{-2\alpha x^2}dx + \left(\tfrac{1}{2}m\omega^2 - \frac{2\alpha^2\hbar^2}{m}\right)\int_{-\infty}^{\infty} x^4e^{-2\alpha x^2}dx\right], \\
\left\langle \hat{H} \right\rangle &= \frac{3\alpha\hbar^2}{2m} + \frac{3m\omega^2}{8\alpha}.
\end{aligned} \tag{XVII.13}$$

Esta energía se minimiza si

$$\frac{d\left\langle \hat{H} \right\rangle}{d\alpha} = \frac{3\hbar^2}{2m} - \frac{3m\omega^2}{8\alpha^2} = 0, \tag{XVII.14}$$

o sea, para

$$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}. \tag{XVII.15}$$

Nótese que este valor coincide con el obtenido previamente, ecuación (XVII.5), lo que sugiere un exponencial común para las funciones de onda (como efectivamente es el caso). Una vez más, de

$$\left.\frac{d^2\left\langle \hat{H} \right\rangle}{d\alpha^2}\right|_{\alpha=m\omega/2\hbar} = \left.\frac{3m\omega^2}{4\alpha^3}\right|_{\alpha=m\omega/2\hbar} = \frac{6\hbar^3}{m^2\omega} > 0$$

sigue que se trata de un mínimo; su valor es

$$\hat{H}_{1\text{mín}} = \left\langle \hat{H}\left(\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}\right)\right\rangle = \tfrac{3}{2}\hbar\omega, \tag{XVII.16}$$

con lo que una cota superior para la energía del primer estado excitado del oscilador armónico es

$$E_1 \leq \tfrac{3}{2}\hbar\omega. \tag{XVII.17}$$

La función de prueba (XVII.10) coincide con la eigenfunción del primer estado excitado cuando se inserta el valor de los parámetros determinado con el procedimiento anterior, lo que da

$$\psi_1(x) = 2\left(\frac{m^3\omega^3}{4\pi\hbar^3}\right)^{1/4} x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right). \tag{XVII.18}$$

De aquí que también en este caso la cota dada por la igualdad en (XVII.17) coincida con el eigenvalor exacto.

La función de prueba propuesta para el segundo estado excitado del oscilador armónico unidimensional es

$$\psi_2(x) = A_2\left(1 + bx^2\right)e^{-\alpha x^2}. \tag{XVII.19}$$

Esta función es ortogonal a la función de onda del primer estado excitado para cualquier selección de los parámetros b y α, pues son funciones de paridad diferente. Sin embargo, como también debe ser ortogonal a la función del estado base, debe cumplirse que

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(1 + bx^2\right)e^{-2\alpha x^2}dx = \sqrt{\pi}\,(2\alpha)^{-1/2} + \tfrac{1}{2}\sqrt{\pi}b\,(2\alpha)^{-3/2} = 0, \tag{XVII.20}$$

lo que da

$$b = -4\alpha. \tag{XVII.21}$$

Como en los casos anteriores, A_2 se fija con la normalización. Se obtiene

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi_2^*(x)\psi_2(x)\,dx = A_2^2\int_{-\infty}^{\infty}\left(1 - 4\alpha x^2\right)^2 e^{-2\alpha x^2}dx \\ &= A_2^2\left(\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\alpha x^2}dx - 8\alpha\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-2\alpha x^2}dx\right. \\ &\quad \left. + 16\alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}x^4e^{-2\alpha x^2}dx\right) = A_2^2\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}}, \end{aligned}$$

o sea,

$$A_2 = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/4}. \tag{XVII.22}$$

El valor esperado del hamiltoniano con esta función de prueba es

$$\begin{aligned} \left\langle\hat{H}\right\rangle &= A_2^2\int_{-\infty}^{\infty}\left(1 - 4\alpha x^2\right)e^{-\alpha x^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\left(1 - 4\alpha x^2\right)e^{-\alpha x^2}dx \\ &= A_2^2\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(10\alpha - 84\alpha^2x^2 + 192\alpha^3x^4 - 64\alpha^4x^6\right)e^{-2\alpha x^2}dx + \right. \\ &\quad \left. + \tfrac{1}{2}m\omega^2\int_{-\infty}^{\infty}\left(x^2 - 8\alpha x^4 + 16\alpha^2x^6\right)e^{-2\alpha x^2}dx\right\}, \\ \left\langle\hat{H}\right\rangle &= \frac{5\alpha\hbar^2}{2m} + \frac{5m\omega^2}{8\alpha}. \end{aligned} \tag{XVII.23}$$

Minimizando $\left\langle\hat{H}\right\rangle$ como función de α,

$$\frac{d\left\langle\hat{H}\right\rangle}{d\alpha} = \frac{5\hbar^2}{2m} - \frac{5m\omega^2}{8\alpha^2} = 0,$$

se obtiene una vez más que

$$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar} \tag{XVII.24}$$

y se verifica fácilmente que se trata de un mínimo, de valor

$$\left\langle\hat{H}\left(\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}\right)\right\rangle = \tfrac{5}{2}\hbar\omega.$$

Para el segundo estado excitado del oscilador armónico se obtiene de esta manera la cota superior

$$E_2 \leq \tfrac{5}{2}\hbar\omega. \tag{XVII.25}$$

Con el valor (XVII.24) para α, la propuesta óptima para la función de onda del segundo estado excitado del oscilador armónico unidimensional resulta

$$\psi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(1 - \frac{2m\omega}{\hbar}x^2\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right). \tag{XVII.26}$$

Ésta es la eigenfunción exacta correspondiente; por la misma razón $E_2 = 5\hbar\omega/2$ coincide con el máximo valor permitido por la cota (XVII.25).

La excelente calidad de los resultados anteriores no debe conducir a engaño. Lo que sucede es que la relativa simplicidad del ejemplo ha permitido proponer funciones de prueba que reproducen los resultados exactos. Es claro que no puede esperarse que éste sea el caso en situaciones más complejas. Sin embargo, el ejemplo muestra con claridad que la selección juiciosa de las funciones de prueba es esencial para el éxito del procedimiento variacional. El siguiente problema ilustra este punto.

XVII.3 Para el estudio del estado base de un oscilador armónico se proponen las siguientes funciones de prueba:

a) $\psi(x) = A/\left(1 + ax^2\right)$;

b) $\psi(x) = A/\left(1 + ax^2\right)^2$.

En ambos casos $a > 0$. Justifique esta selección y determine en cada caso una cota superior para la energía del estado base, así como $\langle x^2\rangle$ y $\langle \hat{p}^2\rangle$; compare con los resultados exactos.

a) Consideremos la primera función de prueba propuesta,

$$\psi\,(x) = \frac{A}{1 + ax^2}. \tag{XVII.27}$$

Esta función es par, tiende a cero cuando $|x| \to \infty$ (aunque demasiado lentamente) y no posee ningún nodo finito; para $a > 0$ es finita en todo punto e integrable. Por tanto se puede considerar la ψ dada por (XVII.27) como una función de prueba (medianamente) aceptable para la descripción del estado base del oscilador.

Como antes, el valor de la constante A se determina de la condición de normalización,

$$A^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\left(1 + ax^2\right)^2} = 1.$$

Usando la fórmula[1]

$$\int_0^{\infty}\frac{x^{2m}}{\left(ax^2 + c\right)^n}dx = \frac{(2m-1)!!\,(2n-2m-3)!!\pi}{2\,(2n-2)!!a^m c^{n-m-1}\sqrt{ac}} \quad (a, c > 0, n > m-1), \tag{XVII.28}$$

[1] Gradshteyn y Ryzhik (1980), 3.251.4.

se obtiene

$$A = \left(\frac{2\sqrt{a}}{\pi}\right)^{1/2}. \tag{XVII.29}$$

El valor esperado de $\hat{H}$ calculado con esta función de prueba es

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{H} \right\rangle &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+ax^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\frac{1}{1+ax^2}dx \\ &= \frac{\hbar^2 a^2 A^2}{m}\left[-4\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2 dx}{(1+ax^2)^4} + \frac{1}{a}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{(1+ax^2)^3}\right] \\ &\quad + \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2 dx}{(1+ax^2)^2}.\end{aligned} \tag{XVII.30}$$

Utilizando (XVII.28) se obtiene

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = A^2\left(\frac{\pi\hbar^2\sqrt{a}}{8m} + \frac{\pi m\omega^2}{4\sqrt{a^3}}\right), \tag{XVII.31}$$

que con ayuda de (XVII.29) se reduce a

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\hbar^2 a}{4m} + \frac{m\omega^2}{2a}. \tag{XVII.32}$$

Debemos ahora minimizar $\left\langle \hat{H} \right\rangle$ como función de a. De la condición

$$\frac{d\left\langle \hat{H} \right\rangle}{da} = \frac{\hbar^2}{4m} - \frac{m\omega^2}{2a^2} = 0$$

se obtiene que el mínimo ocurre para

$$a = \frac{\sqrt{2}m\omega}{\hbar} \tag{XVII.33}$$

y vale

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\text{mín}} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\hbar\omega. \tag{XVII.34}$$

Esta cota para la energía del estado base del oscilador armónico es $\sqrt{2}$ veces el valor correcto, lo que significa un error relativo de magnitud

$$\frac{\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\text{mín}} - \frac{1}{2}\hbar\omega}{\frac{1}{2}\hbar\omega} = \sqrt{2} - 1 = 0.414\ldots \tag{XVII.35}$$

Este grave error se debe al lento decrecimiento de ψ con x, que produce una función de onda con una "cola" muy larga. Esto se manifiesta ya desde el cálculo de a, que fija un valor para $\left\langle x^2 \right\rangle$ (véase la ecuación (XVII.37) abajo) grande por un factor $2\sqrt{2}$ en (XVII.33) respecto al valor correcto dado por la ecuación (T11.16), $\left\langle x^2 \right\rangle = \hbar/2m\omega$.

Con la selección hecha, la mejor propuesta para la función de onda del estado base del oscilador armónico es

$$\psi(x) = \left(\frac{2^{5/2}m\omega}{\pi^2\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{1+\left(\sqrt{2}m\omega/\hbar\right)x^2}. \tag{XVII.36}$$

Con esta función de prueba resulta

$$\langle x^2\rangle = A^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{(1+ax^2)^2} = \frac{1}{a} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}m\omega}, \tag{XVII.37}$$

$$\langle \hat{p}^2\rangle = -\hbar^2A^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{1+ax^2}\frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{1}{1+ax^2}\right)dx = \tfrac{1}{\sqrt{2}}m\hbar\omega, \tag{XVII.38}$$

$$\langle \hat{p}^2\rangle = m^2\omega^2\langle x^2\rangle, \tag{XVII.39}$$

en vez de $\langle x^2\rangle = \hbar/2m\omega$ y $\langle \hat{p}^2\rangle = m\hbar\omega/2$. Las dos dispersiones determinadas con la función de prueba fallan por el mismo factor $\sqrt{2}$ con respecto a los valores exactos. Aún cuando la relación entre ellas es la correcta, su producto resulta el doble de lo correcto, $\langle x^2\rangle\langle \hat{p}^2\rangle = \hbar^2/2$.

b) La segunda función de prueba propuesta (con $a>0$)

$$\psi(x) = \frac{A}{(1+ax^2)^2} \tag{XVII.40}$$

es un poco mejor que la anterior, pues decrece más rápido para $|x|\to\infty$, y es de esperarse que dé mejores resultados. De la condición de normalización,

$$A^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{(1+ax^2)^4} = 1,$$

usando (XVII.28) se obtiene

$$A = \left(\frac{16\sqrt{a}}{5\pi}\right)^{1/2}. \tag{XVII.41}$$

El valor esperado de $\hat{H}$ calculado con esta función de prueba es

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{H}\right\rangle &= A^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(1+ax^2)^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\frac{1}{(1+ax^2)^2}dx\\ &= \frac{2\hbar^2aA^2}{m}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{(1+ax^2)^5} - 6a\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{(1+ax^2)^6}\right]\\ &\quad +\frac{m\omega^2A^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{(1+ax^2)^4},\\ \left\langle \hat{H}\right\rangle &= \frac{\pi A^2}{32}\sqrt{a}\left(\frac{7\hbar^2}{m}+\frac{m\omega^2}{a^2}\right).\end{aligned} \tag{XVII.42}$$

Sustituyendo aquí el valor de A, expresión (XVII.41), queda

$$\left\langle \hat{H}\right\rangle = \frac{1}{10}\left(\frac{7\hbar^2a}{m}+\frac{m\omega^2}{a}\right). \tag{XVII.43}$$

De la condición que minimiza $\left\langle \hat{H}\right\rangle$ respecto de a,

$$\frac{7\hbar^2}{m}-\frac{m\omega^2}{a^2} = 0,$$

se obtiene que el mínimo de $\left\langle \hat{H}\right\rangle$ ocurre para

$$a = \frac{m\omega}{\sqrt{7}\hbar} \tag{XVII.44}$$

y tiene el valor

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\text{mín}} = \tfrac{\sqrt{7}}{5}\hbar\omega. \tag{XVII.45}$$

Con esta cota superior para la energía del estado base del oscilador se obtiene

$$E_0 \leq \tfrac{\sqrt{7}}{5}\hbar\omega. \tag{XVII.46}$$

Comparando con el valor exacto $\frac{1}{2}\hbar\omega$, el error relativo resulta

$$\frac{\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\text{mín}} - \frac{1}{2}\hbar\omega}{\frac{1}{2}\hbar\omega} = \frac{2}{5}\sqrt{7} - 1 = 0.0583\ldots, \tag{XVII.47}$$

resultado mejor que el anterior (XVII.35) casi en un orden de magnitud.

La función de prueba resulta

$$\psi(x) = 4\left(\frac{m\omega}{25\sqrt{7}\pi^2\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\left(1 + m\omega x^2/\sqrt{7}\hbar\right)^2}, \tag{XVII.48}$$

y da las dispersiones

$$\left\langle x^2 \right\rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 dx}{(1+ax^2)^4} = \frac{1}{5a} = \tfrac{\sqrt{7}}{5}\frac{\hbar}{m\omega}, \tag{XVII.49}$$

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = -\hbar^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1+ax^2)^2}\frac{d^2}{dx^2}\frac{1}{(1+ax^2)^2} dx = \tfrac{\sqrt{7}}{5} m\hbar\omega. \tag{XVII.50}$$

Las dispersiones calculadas con esta función de onda fallan por el mismo factor $2\sqrt{7}/5$ con respecto a los valores exactos; igual que antes, la relación entre ellas es la correcta, $\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = m^2\omega^2 \left\langle x^2 \right\rangle$, pero su producto resulta $28/25 = 1.12$ veces el correcto. Hay una mejora sustancial respecto a los resultados obtenidos con la función (XVII.27), debido a la mejor convergencia de la nueva función de prueba. El ejemplo ilustra claramente la enorme influencia que tiene la selección de la función de prueba en la calidad de los resultados producidos por el método variacional.

XVII.4 Resuelva el problema XIV.3,

a) con el método variacional

b) con el método WKB.

Compare estas soluciones con la perturbativa y determine la región de validez de cada una de ellas.

Consideremos una partícula que se mueve sin fricción sobre una circunferencia vertical de radio R, bajo la influencia de la fuerza de gravedad cerca de la superficie terrestre. El hamiltoniano de este sistema es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0R^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + m_0gR\,\text{sen}\,\varphi = \frac{\hat{L}_z{}^2}{2m_0R^2} + m_0gR\,\text{sen}\,\varphi. \tag{XVII.51}$$

Tomaremos como función de prueba para aplicar el método variacional al estado base del sistema la expresión

$$\psi(\varphi) = A\left(1 + i\alpha e^{i\varphi}\right), \tag{XVII.52}$$

con α el parámetro variacional. Para $g = 0$ el estado base corresponde a la función propia de $\hat{L}_z$ con eigenvalor 0, que es una constante; la función (XVII.52) se reduce a una constante cuando $\alpha = 0$. Por lo tanto, el término periódico en φ representa la corrección introducida por los efectos del campo gravitatorio terrestre sobre el estado base. La constante A se determina de la condición de normalización, lo que da

$$A^2 \int_0^{2\pi} \left(1 - 2\alpha \operatorname{sen}\varphi + \alpha^2\right)\, d\varphi = 2\pi A^2 \left(1 + \alpha^2\right) = 1,$$

es decir,

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\,(1+\alpha^2)}}. \tag{XVII.53}$$

El valor esperado de la energía calculado con esta función de prueba es

$$\begin{aligned}
\left\langle \hat{H} \right\rangle &= \frac{1}{2\pi(1+\alpha^2)} \int_0^{2\pi} (1 - i\alpha e^{-i\varphi}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0R^2} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + m_0 g R \operatorname{sen}\varphi \right) \\
&\quad \times (1 + i\alpha e^{i\varphi}) d\varphi \\
&= \frac{1}{2\pi(1+\alpha^2)} \left\{ \frac{i\hbar^2\alpha}{2m_0R^2} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi}\, d\varphi + \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m_0R^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \right. \\
&\quad \left. + (1+\alpha^2) m_0 g R \int_0^{2\pi} \operatorname{sen}\varphi\, d\varphi - 2m_0 g R\alpha \int_0^{2\pi} \operatorname{sen}^2\varphi\, d\varphi \right\} \\
&= \frac{1}{1+\alpha^2} \left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m_0R^2} - m_0 g R\alpha \right) = \frac{a\alpha^2 - b\alpha}{1+\alpha^2},
\end{aligned} \tag{XVII.54}$$

donde hemos puesto

$$a = \frac{\hbar^2}{2m_0R^2}, \quad b = m_0 g R. \tag{XVII.55}$$

Debemos ahora minimizar $\left\langle \hat{H} \right\rangle$ como función de α. De la condición

$$\frac{d\left\langle \hat{H} \right\rangle}{d\alpha} = \frac{b\alpha^2 + 2a\alpha - b}{\left(1+\alpha^2\right)^2} = 0$$

se obtiene que el mínimo ocurre para

$$\alpha = -\frac{a}{b} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{b^2}{a^2}} \right) \tag{XVII.56}$$

y vale

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\text{mín}} = a \left(1 - \frac{\eta}{2} \frac{\sqrt{1+\eta}}{1 + \eta - \sqrt{1+\eta}} \right), \tag{XVII.57}$$

con

$$\eta = \frac{b^2}{a^2} = \frac{4m_0^4 g^2 R^6}{\hbar^4}. \tag{XVII.58}$$

Pese a su aparente complejidad, la función (XVII.57) varía de manera esencialmente lineal con η para valores positivos de esta variable aún cercanos a la unidad, por lo que en un desarrollo en serie de Taylor basta mantener términos hasta primer orden. Como $1 + \eta - \sqrt{1+\eta} = \eta/2 + \cdots$, se obtiene

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\text{mín}} \simeq a \left(1 - \sqrt{1+\eta} \right) \simeq -a\frac{\eta}{2} = -\frac{b^2}{2a} = -\frac{m_0^3 g^2 R^4}{\hbar^2}. \tag{XVII.59}$$

Por lo tanto esta función de prueba da como cota superior para la energía del estado base del sistema

$$E_0 \leq -\frac{m_0^3 g^2 R^4}{\hbar^2}, \tag{XVII.60}$$

resultado que, tomado con el signo de igualdad, coincide con el obtenido en el problema XIV.3 mediante el uso de la teoría de perturbaciones.

Analicemos ahora este problema con el método WKB. Con

$$p_\varphi = \sqrt{2m_0R^2\left(E - m_0gR\,\mathrm{sen}\,\varphi\right)} \tag{XVII.61}$$

la condición de cuantización, ecuación (T7.28), nos lleva a la siguiente expresión para los niveles de energía:

$$\int_0^{2\pi} p_\varphi\, d\varphi = \sqrt{2m_0E}R \int_0^{2\pi} \sqrt{1 - \frac{m_0gR}{E}\,\mathrm{sen}\,\varphi}\, d\varphi = 2\pi\hbar\left(n + \tfrac{1}{2}\right). \tag{XVII.62}$$

Ésta es una integral elíptica de segunda clase que puede resolverse de manera exacta, por ejemplo, con el cambio de variable $x^2 = 1 - a\,\mathrm{sen}\,\varphi$. Como finalmente se requerirá hacer desarrollos en serie, para simplificar el cálculo consideraremos desde aquí que m_0gR/E es suficientemente pequeña como para que baste retener los primeros términos del desarrollo del radical, lo que nos permite escribir

$$\sqrt{1 - \frac{m_0gR}{E}\,\mathrm{sen}\,\varphi} = 1 - \frac{m_0gR}{2E}\,\mathrm{sen}\;\varphi - \frac{m_0^2g^2R^2}{8E^2}\,\mathrm{sen}^2\,\varphi - \cdots,$$

de donde

$$\begin{aligned}\sqrt{2m_0E}R \int_0^{2\pi} \sqrt{1 - \frac{m_0gR}{E}\,\mathrm{sen}\,\varphi}\, d\varphi &= \sqrt{2m_0E}R\left(2\pi - \frac{\pi m_0^2g^2R^2}{8E^2} - \cdots\right) \\ &= 2\pi\hbar\left(n + \tfrac{1}{2}\right).\end{aligned} \tag{XVII.63}$$

Elevando al cuadrado y cortando el desarrollo a segundo orden, se obtiene

$$E_n^2 - \frac{\hbar^2}{2m_0R^2}\left(n + \tfrac{1}{2}\right)^2 E_n - \tfrac{1}{8}g^2m_0^2R^2 = 0. \tag{XVII.64}$$

De aquí que en esta aproximación resulte, con $I = m_0R^2$,

$$E_n = \frac{\hbar^2}{4I}\left(n + \tfrac{1}{2}\right)^2\left[1 \pm \sqrt{1 + \frac{2g^2m_0I^3}{\hbar^4\left(n + \frac{1}{2}\right)^4}}\right]. \tag{XVII.65}$$

Tomamos primero el signo negativo que corresponde al estado de menor energía, $n = 0$. Haciendo de nuevo un desarrollo en serie del argumento de la raíz se llega a

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{4I}\left[-\frac{g^2m_0I^3}{\hbar^4\left(\frac{1}{2}\right)^2} + \ldots\right] = -\frac{g^2m_0I^2}{\hbar^2}. \tag{XVII.66}$$

Por otro lado, para los estados excitados debemos tomar el signo positivo en (XVII.65), lo que conduce a

$$\begin{aligned}E_n &= \frac{\hbar^2}{4I}\left(n + \tfrac{1}{2}\right)^2\left[2 + \frac{g^2m_0I^3}{\hbar^4\left(n + \frac{1}{2}\right)^4}\right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2I}\left(n + \tfrac{1}{2}\right)^2 + \frac{g^2m_0I^2}{4\hbar^2\left(n + \frac{1}{2}\right)^2}.\end{aligned} \tag{XVII.67}$$

Para $n \gg 1$ podemos despreciar el sumando $1/2$ y escribir

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2I} n^2 + \frac{g^2 m_0 I^2}{4\hbar^2 n^2}. \tag{XVII.68}$$

Ambos resultados, dados por las ecuaciones (XVII.66) para el estado base y (XVII.68) para los estados excitados para $n \gg 1$, se comparan favorablemente con la predicción de la teoría de perturbaciones, ecuación (XIV.56), o sea

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2I} n^2 + \frac{g^2 m_0 I^2}{\hbar^2 \left(4n^2 - 1\right)}. \tag{XVII.69}$$

XVII.5 Estudie el problema de una partícula atrapada por el potencial de Yukawa,

$$V = -g^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r},$$

mediante el método variacional. Determine el valor máximo de α para el cual existe al menos un estado ligado. Pase al límite del potencial coulombiano y demuestre que para este potencial siempre existe espectro discreto. Determine la función de onda y la energía del estado base óptimas en el límite coulombiano. *Sugerencia*: para que las soluciones coulombianas resulten exactas, es conveniente tomar como función de prueba $\psi = Ae^{-\beta r}$.

La función de prueba sugerida

$$\psi(r) = Ae^{-\beta r}, \tag{XVII.70}$$

con β el parámetro variacional, cumple todos los requisitos de una buena función de prueba para el estudio del estado base del sistema dado (es de cuadrado integrable, decae exponencialmente en el infinito, no posee nodos, tiene a la solución coulombiana como límite, es simple de manejar y contiene sólo un parámetro). La constante A se determina de la condición de normalización,

$$4\pi A^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2\beta r} dr = \frac{\pi A^2}{\beta^3} = 1,$$
$$A = \sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}}. \tag{XVII.71}$$

El valor esperado para la energía calculado con esta función de prueba es

$$\begin{aligned}
\left\langle \hat{H} \right\rangle &= 4\beta^3 \int_0^\infty r^2 e^{-\beta r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - g^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r} \right) e^{-\beta r} dr \\
&= 4\beta^3 \left[-\frac{\hbar^2 \beta}{2m} \int_0^\infty e^{-2\beta r} r^2 dr \left(\beta - \frac{2}{r} \right) - g^2 \int_0^\infty r e^{-(2\beta+\alpha) r} dr \right] \\
&= 4\beta^3 \left[\frac{\hbar^2}{4m\beta} - \frac{\hbar^2}{8m\beta} - \frac{g^2}{(2\beta+\alpha)^2} \right],
\end{aligned}$$

es decir,

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \beta^2 - \frac{4g^2 \beta^3}{(2\beta+\alpha)^2} = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{8m} \lambda^2 - \frac{g^2 \alpha \lambda^3}{2(1+\lambda)^2}, \tag{XVII.72}$$

en donde se introdujo el parámetro adimensional

$$\lambda = \frac{2\beta}{\alpha}. \tag{XVII.73}$$

Si ahora ponemos

$$K = \frac{2mg^2}{\hbar^2\alpha} \tag{XVII.74}$$

podemos escribir (XVII.72) en la forma adimensional

$$\frac{\left\langle \hat{H} \right\rangle}{\alpha g^2} = \frac{\lambda^2}{4K} - \frac{\lambda^3}{2\left(1+\lambda\right)^2}. \tag{XVII.75}$$

Tomando a λ como el parámetro variacional, el valor λ_0 para el cual la energía media es mínima se obtiene de la condición

$$\left.\frac{d}{d\lambda}\frac{\left\langle \hat{H} \right\rangle}{\alpha g^2}\right|_{\lambda=\lambda_0} = 0,$$

que da

$$\frac{\lambda_0}{2K} - \frac{3\lambda_0^2}{2\left(1+\lambda_0\right)^2} + \frac{\lambda_0^3}{\left(1+\lambda_0\right)^3} = 0, \tag{XVII.76}$$

o bien,

$$K = \frac{\left(1+\lambda_0\right)^3}{\lambda_0\left(\lambda_0+3\right)}. \tag{XVII.77}$$

Sustituyendo en (XVII.75) y despejando, se obtiene, con $E = \left\langle \hat{H}(\lambda_0) \right\rangle$,

$$E = -\alpha g^2 \frac{\lambda_0^3\left(\lambda_0-1\right)}{4\left(1+\lambda_0\right)^3}. \tag{XVII.78}$$

Como de (XVII.73) sigue que $\lambda_0 > 0$, vemos que existe al menos un estado ligado sólo si

$$\lambda_0 \geq 1, \tag{XVII.79}$$

lo que a su vez demanda que

$$K = \frac{2mg^2}{\hbar^2\alpha} = \frac{\left(1+\lambda_0\right)^3}{\lambda_0\left(\lambda_0+3\right)} \geq 2, \tag{XVII.80}$$

es decir,

$$\alpha \leq \frac{mg^2}{\hbar^2}. \tag{XVII.81}$$

Por lo tanto, el valor máximo que puede tomar α para que exista al menos un estado ligado es

$$\alpha_{\text{máx}} = \frac{mg^2}{\hbar^2}. \tag{XVII.82}$$

Si α excede este límite, el potencial de ligadura difiere de cero en una región del espacio insuficiente para mantener ligada a la partícula. De la expresión para el potencial

$$V = -g^2\frac{e^{-\alpha r}}{r} \tag{XVII.83}$$

sigue que su alcance es del orden de $R_{\text{ef}} = \alpha^{-1}$, por lo que la condición anterior equivale a exigir que $R_{\text{ef}} \geq \hbar^2/mg^2$. Si el potencial se escribe en la forma

$$V = -g^2\frac{e^{-\alpha r}}{r} = -\alpha g^2\frac{e^{-\alpha r}}{\alpha r} \equiv -V_0\frac{e^{-\alpha r}}{\alpha r}, \quad V_0 = \frac{g^2}{R_{\text{ef}}}, \tag{XVII.84}$$

la condición anterior se transforma en $V_0 R_{\text{ef}}^2 \geq \hbar^2/m$. Comparando con el resultado (XIII.365) del problema XIII.36 para partículas ligadas por un potencial delta, vemos que en este límite el potencial de Yukawa puede considerarse como esencialmente equivalente a una función delta de Dirac, y se le aplican las restricciones previamente determinadas para potenciales de esta forma.

El límite coulombiano se obtiene tomando $\alpha \to 0$ y $g^2 \to e^2$. En este límite $\lambda_0 = 2\beta_0/\alpha \gg 1$, por lo que se puede aproximar

$$E = -e^2\alpha\frac{\lambda_0^3\left(\lambda_0 - 1\right)}{4\left(1+\lambda_0\right)^3} \approx -e^2\alpha\frac{\lambda_0}{4} = -\tfrac{1}{2}e^2\beta_0. \tag{XVII.85}$$

Como este valor es negativo, hay siempre un espectro discreto en este caso, independientemente del valor específico de α. Además, en este límite podemos escribir

$$K = \frac{2me^2}{\hbar^2\alpha} = \frac{\left(\alpha+2\beta_0\right)^3}{2\alpha\beta_0\left(3\alpha+2\beta_0\right)} \simeq \frac{2\beta_0}{\alpha}, \tag{XVII.86}$$

de donde sigue que la β que minimiza el valor esperado de la energía es

$$\beta_0 = \frac{me^2}{\hbar^2} = \frac{1}{a_0}, \tag{XVII.87}$$

donde a_0 es el radio de Bohr. De aquí sigue para el valor mínimo de la energía del estado base en el límite coulombiano

$$E = \lim_{\alpha\to 0}\left[-e^2\frac{\left(2\beta_0\right)^3\left(2\beta_0-\alpha\right)}{4\left(\alpha+2\beta_0\right)^3}\right] = -\frac{e^2}{2}\beta_0 = -\frac{e^2}{2a_0}. \tag{XVII.88}$$

Este resultado reproduce exactamente la energía del estado base del átomo de hidrógeno. La mejor aproximación a la función de onda para el estado base se obtiene sustituyendo (XVII.87) en (XVII.70), de donde resulta

$$\psi_0\left(r\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}, \tag{XVII.89}$$

expresión que coincide con la solución exacta para este caso.

XVII.6 En física nuclear con frecuencia se toma como modelo de pozos atractivos un potencial de oscilador armónico truncado: $V = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 - a^2)$ para $|x| \leq a$ y $V = 0$ para $|x| \geq a$.

a) Utilice el método variacional para estimar la energía del estado base y del primer estado excitado.

b) Estime los eigenvalores anteriores usando el método WKB. ¿Bajo qué condiciones puede el pozo contener un único estado ligado?

Compare resultados y determine cuáles son más confiables.

a) El potencial

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 - a^2\right), & |x| \leq a, \\ 0, & |x| \geq a \end{cases} \tag{XVII.90}$$

es atractivo en el intervalo $|x| \leq a$ y posee un mínimo de valor $V_{\text{mín}} = -\frac{1}{2}m\omega^2 a^2$ en el punto $x = 0$, por lo que las soluciones estacionarias con $V_{\text{mín}} < E < 0$ corresponden a estados ligados. Como la función de prueba para estudiar el estado base debe ser par, sin nodos y decrecer suficientemente rápido fuera del pozo, una aproximación razonable está dada por la función

$$\psi(x) = \begin{cases} \left(b^2 - x^2\right)^2, & |x| \leq b, \\ 0, & |x| \geq b, \end{cases} \tag{XVII.91}$$

que decrece suavemente en la región "interna" $|x| \leq b$; b^2 se tomará como el parámetro variacional. El valor esperado de la energía es

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\left\langle \psi \mid \hat{H} \mid \psi \right\rangle}{\langle \psi \mid \psi \rangle}, \tag{XVII.92}$$

con

$$\langle \psi \mid \psi \rangle = \int_{-b}^{b} \left(b^2 - x^2\right)^4 dx = \frac{2^8}{5 \cdot 7 \cdot 9} b^9. \tag{XVII.93}$$

Supondremos que $b < a$ al realizar las integrales, con lo que se obtiene

$$\begin{aligned} \left\langle \psi \mid \hat{H} \mid \psi \right\rangle &= \int_{-b}^{b} (b^2 - x^2)^2 \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2(x^2 - a^2) \right] (b^2 - x^2)^2 \, dx \\ &= \frac{2^7}{5 \cdot 7 \cdot 9} \left(\frac{3\hbar^2}{mb^2} + \tfrac{1}{11}m\omega^2 b^2 - m\omega^2 a^2 \right) b^9. \end{aligned} \tag{XVII.94}$$

Por lo tanto, el valor esperado de la energía es

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\left\langle \psi \mid \hat{H} \mid \psi \right\rangle}{\langle \psi \mid \psi \rangle} = \tfrac{3}{2}\frac{\hbar^2}{mb^2} + \tfrac{1}{22}m\omega^2 b^2 - \tfrac{1}{2}m\omega^2 a^2. \tag{XVII.95}$$

La legitimidad de la hipótesis $b < a$ se puede verificar al final, notando que (XVII.95) debe ser consistente con la condición $\left\langle \hat{H} \right\rangle < 0$, lo que determina un valor máximo aceptable para la cantidad $\hbar/m\omega a^2$.

Derivando respecto al parámetro variacional b^2 e igualando a cero se obtiene que el valor esperado de la energía se mínimiza con

$$b^2 = \sqrt{33}\frac{\hbar}{m\omega}. \tag{XVII.96}$$

En esta aproximación el valor estimado (tomado como la cota superior) de la energía del estado base resulta, usando (XVII.95),

$$E_0 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{12}{11}}\hbar\omega - \tfrac{1}{2}m\omega^2 a^2 = 0.522\hbar\omega - \tfrac{1}{2}m\omega^2 a^2. \tag{XVII.97}$$

Para el primer estado excitado proponemos como función de prueba

$$\psi(x) = \begin{cases} x\left(b^2 - x^2\right)^2, & |x| \leq b, \\ 0, & |x| \geq b, \end{cases} \tag{XVII.98}$$

la cual es impar (y por lo tanto ortogonal a la función de prueba del estado base), decrece suavemente en los extremos de la región $|x| \leq b$ y posee un nodo dentro del pozo. En este caso

$$\langle \psi \mid \psi \rangle = \int_{-b}^{b} x^2 \left(b^2 - x^2\right)^4 \, dx = \frac{2^8}{5 \cdot 7 \cdot 9 \cdot 11} b^{11} \tag{XVII.99}$$

y, tomando una vez más $b < a$,

$$\begin{aligned} \left\langle \psi \mid \hat{H} \mid \psi \right\rangle &= \int_{-b}^{b} x(b^2 - x^2)^2 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2} m\omega^2 (x^2 - a^2) \right] x(b^2 - x^2)^2 \, dx \\ &= \frac{2^7}{5 \cdot 7 \cdot 9 \cdot 11} \left(11 \frac{\hbar^2}{mb^2} + \tfrac{3}{13} m\omega^2 b^2 - m\omega^2 a^2 \right) b^{11}. \end{aligned} \tag{XVII.100}$$

De aquí que el valor esperado de la energía calculado con esta función de prueba resulte

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\left\langle \psi \mid \hat{H} \mid \psi \right\rangle}{\langle \psi \mid \psi \rangle} = \tfrac{11}{2} \frac{\hbar^2}{mb^2} + \tfrac{3}{26} m\omega^2 b^2 - \tfrac{1}{2} m\omega^2 a^2. \tag{XVII.101}$$

Esta $\left\langle \hat{H} \right\rangle$ toma un valor mínimo para

$$b^2 = \sqrt{\frac{11 \cdot 13}{3}} \frac{\hbar}{m\omega}, \tag{XVII.102}$$

que da para la energía del primer estado excitado (igualada con la cota superior)

$$E_1 = \sqrt{\frac{33}{13}} \hbar\omega - \tfrac{1}{2} m\omega^2 a^2 \simeq 1.593 \hbar\omega - \tfrac{1}{2} m\omega^2 a^2. \tag{XVII.103}$$

b) Analicemos ahora este problema con el método WKB. La condición de cuantización es (cf. ecuación (T7.28))

$$\int_{x_1}^{x_2} p\,(x) \, dx = \pi\hbar \left(n + \tfrac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{XVII.104}$$

donde x_1 y $x_2 > x_1$, son los puntos de retorno determinados con la condición $V\,(x_1) = V\,(x_2) = E$. Para $V\,(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x^2 - a^2\right)$ estos puntos son

$$x_2 = -x_1 = \sqrt{a^2 + \frac{2E}{m\omega^2}}. \tag{XVII.105}$$

Como en la aproximación semiclásica el momento es

$$p = \sqrt{2mE + m^2\omega^2 a^2 - m^2\omega^2 x^2}, \tag{XVII.106}$$

los niveles de energía quedan dados por la condición

$$\begin{aligned} \int_{x_1}^{x_2} p \, dx &= \sqrt{2mE + m^2\omega^2 a^2} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{1 - \frac{m^2\omega^2}{2mE + m^2\omega^2 a^2} x^2} \, dx \\ &= \frac{2E + m\omega^2 a^2}{\omega} \int_{-1}^{1} \sqrt{1 - t^2} dt = \pi\hbar \left(n + \tfrac{1}{2}\right), \end{aligned} \tag{XVII.107}$$

donde se puso

$$t = \sqrt{\frac{m^2\omega^2}{2mE + m^2\omega^2 a^2}}\, x.$$

Considerando que

$$\int_{-1}^{1} \sqrt{1-t^2}dt = \frac{\pi}{2}, \tag{XVII.108}$$

se obtiene

$$\frac{2E + m\omega^2 a^2}{2\omega} = \hbar\left(n + \tfrac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{XVII.109}$$

y los niveles discretos de energía resultan

$$E_n^{\mathrm{WKB}} = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right) - \tfrac{1}{2}m\omega^2 a^2. \tag{XVII.110}$$

La condición $E < 0$ implica que no puede haber un número infinito de estados ligados. El máximo valor posible de n, $N_{\mathrm{máx}}$, está dado por la n entera máxima que cumple la condición

$$\hbar\omega\left(N_{\mathrm{máx}} + \tfrac{1}{2}\right) - \tfrac{1}{2}m\omega^2 a^2 \leq 0, \tag{XVII.111}$$

es decir,

$$N_{\mathrm{máx}} = \sup(n \in \mathbb{Z}) \leq \frac{m\omega a^2}{2\hbar} - \frac{1}{2}. \tag{XVII.112}$$

Como en la presente aproximación las energías del estado base y del primer estado excitado están dadas por

$$\begin{aligned} E_0^{\mathrm{WKB}} &= \tfrac{1}{2}\hbar\omega - \tfrac{1}{2}m\omega^2 a^2, \\ E_1^{\mathrm{WKB}} &= \tfrac{3}{2}\hbar\omega - \tfrac{1}{2}m\omega^2 a^2, \end{aligned}$$

para que exista un estado ligado debe cumplirse que (compare con los puntos de retorno)

$$\tfrac{1}{2}m\omega^2 a^2 > \tfrac{1}{2}\hbar\omega,$$

es decir,

$$a^2 > \frac{\hbar}{m\omega},$$

y para que éste sea único, debe tenerse simultáneamente que

$$a^2 < \frac{3\hbar}{m\omega}$$

(de manera que no pueda darse el primer estado excitado). Luego la condición para que haya un solo estado ligado es

$$\frac{\hbar}{m\omega} < a^2 < \frac{3\hbar}{m\omega}. \tag{XVII.113}$$

Es sencillo comprobar que estos valores para a^2 son consistentes con la condición $b < a$ supuesta cuando se empleó el método variacional.

Los resultados obtenidos con el método WKB son más confiables que los obtenidos con el método variacional, debido a que estos últimos dependen en gran medida de la calidad de la función de prueba propuesta, la que es esencialmente

arbitraria. Además, el método variacional proporciona cotas superiores para la energía, no sus valores. En el presente caso puede agregarse la consideración de que el potencial de oscilador armónico se trunca en una región en la que la función de onda es pequeña (debido al decaimiento exponencial en el exterior de los puntos de retorno), por lo que debe esperarse que el cálculo WKB, que da resultados exactos para el oscilador armónico, sea muy confiable, a pesar de que se trata de estados de baja excitación.

XVII.7 Utilice el método variacional para demostrar que cualquier potencial puramente atractivo tiene al menos un estado ligado, cualquiera que sea su profundidad. *Sugerencia*: una función de prueba gaussiana es muy apropiada para este fin.

Si existe al menos un estado ligado, éste será un estado s y sin nodos, por lo que una función de prueba gaussiana centrada en el origen es una selección suficientemente general, por la rapidez con que decae. Poniendo

$$\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}, \quad \alpha > 0, \tag{XVII.114}$$

la condición de normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2}\,dx = A^2\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = 1$$

conduce a la función de prueba normalizada

$$\psi(x) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2}. \tag{XVII.115}$$

Llamemos E_0 a la energía del estado base. Del método variacional de Rayleigh-Ritz sabemos que E_0 satisface la desigualdad (T17.4), es decir,

$$E_0 \leq E' \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\hat{H}\psi(x)\,dx. \tag{XVII.116}$$

En el presente caso tenemos

$$\begin{aligned} E' &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x)\,dx \\ &= \frac{\hbar^2\alpha}{m}\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2}(1-2\alpha x^2)\,dx + \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} V(x)e^{-2\alpha x^2}\,dx \\ &= \frac{\hbar^2\alpha}{2m} + \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} V(x)e^{-2\alpha x^2}\,dx. \end{aligned} \tag{XVII.117}$$

El valor mínimo de E' se obtiene para la α que satisface la condición

$$\left.\frac{dE'}{d\alpha}\right|_{\alpha_{\text{mín}}} = 0. \tag{XVII.118}$$

Explícitamente, esta condición es

$$\frac{\hbar^2}{2m} + \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha}}\int_{-\infty}^{\infty}(1-4\alpha x^2)V(x)\,e^{-2\alpha x^2}\,dx = 0. \tag{XVII.119}$$

De aquí tenemos que $\alpha_{\text{mín}}$ es solución de la ecuación

$$\frac{\hbar^2\alpha}{2m} = -\sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}(1-4\alpha x^2)V(x)\,e^{-2\alpha x^2}\,dx. \tag{XVII.120}$$

Sustituyendo este resultado en (XVII.117) se obtiene

$$\begin{aligned} E' &= \left[\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} - \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\right]\int_{-\infty}^{\infty} V(x)e^{-2\alpha x^2}\,dx + 4\alpha\sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x^2V(x)e^{-2\alpha x^2}\,dx \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} V(x)e^{-2\alpha x^2}\,dx + 4\alpha\sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x^2V(x)e^{-2\alpha x^2}\,dx, \end{aligned}$$

es decir,

$$E' = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(1+4\alpha x^2\right)V(x)\,e^{-2\alpha x^2}\,dx. \tag{XVII.121}$$

Concluimos que la energía del estado base debe satisfacer la condición

$$E_0 \leq E' = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(1+4\alpha x^2\right)V(x)\,e^{-2\alpha x^2}\,dx, \quad \alpha > 0. \tag{XVII.122}$$

Para potenciales puramente atractivos, es decir, negativos para toda x, el integrando es negativo y se cumple que

$$E_0 \leq E' < 0. \tag{XVII.123}$$

Estos resultados muestran que para potenciales puramente atractivos ($V(x) < 0$ para toda x) siempre existe una $\alpha > 0$ para la cual la integral de la expresión (XVII.122) es negativa. Con esto queda demostrado que existe al menos un estado ligado, sin importar la profundidad del potencial.

XVII.8 Deduzca detalladamente la ecuación (T17.36) para la energía total de un átomo dada por el método Hartree-Fock.

El hamiltoniano de un átomo que contiene N electrones lo escribimos en la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \tag{XVII.124}$$

con

$$\hat{H}_1 = \sum_k \hat{H}_0\left(\mathbf{r}_k\right) \tag{XVII.125}$$

y

$$\hat{H}_2 = \sum_{k<l} V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) = \tfrac{1}{2}\sum_{k\neq l} V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l). \tag{XVII.126}$$

El término $\hat{H}_1$ es la suma de los hamiltonianos de los N electrones tomados como independientes, y contiene las contribuciones de la energía cinética y la energía potencial debida a fuerzas externas, en caso de que las haya. El término $\hat{H}_2$ es la energía de acoplamiento entre los electrones, donde $V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l)$ denota a la interacción del electrón k con el electrón l, con $k \neq l$. Si despreciamos las fuerzas que dependen del espín, $V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l)$ es simplemente el potencial coulombiano de repulsión entre parejas de electrones.

En el método variacional de Hartree y Fock se propone como función de prueba el producto, debidamente antisimetrizado, de las funciones de onda de partículas independientes,

$$\Psi\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N\right) = \sum_P (-1)^{r_P}\, \hat{P}\varphi_1\left(\mathbf{r}_1\right)\varphi_2\left(\mathbf{r}_2\right)\cdots\varphi_N\left(\mathbf{r}_N\right) \equiv \sum_P (-1)^{r_P}\, \hat{P}\Phi, \tag{XVII.127}$$

donde Φ es el producto de las funciones de onda de partícula independiente,

$$\Phi = \varphi_1\left(\mathbf{r}_1\right)\varphi_2\left(\mathbf{r}_2\right)\cdots\varphi_N\left(\mathbf{r}_N\right) \tag{XVII.128}$$

y $\hat{P}$ es el operador de permutaciones. El valor esperado de la energía es

$$E = \left\langle \hat{H}_1 \right\rangle + \left\langle \hat{H}_2 \right\rangle. \tag{XVII.129}$$

Como $\hat{H}_1$ y $\hat{H}_2$ son ambos invariantes ante los operadores de permutación de las partículas, se puede escribir, tomando en cuenta la ortogonalidad de los estados atómicos (cf. ecuación (T17.27)),

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{H}_1 \right\rangle &= \left\langle \Psi \mid \hat{H}_1 \mid \Psi \right\rangle = \sum_k \sum_P (-1)^{r_P} \left\langle \Phi \mid \hat{H}_0(\mathbf{r}_k)\hat{P} \mid \Phi \right\rangle \\ &= \sum_k \left\langle \Phi \mid \hat{H}_0(\mathbf{r}_k) \mid \Phi \right\rangle = \sum_k \left\langle k \mid \hat{H}_0(\mathbf{r}_k) \mid k \right\rangle. \end{aligned} \tag{XVII.130}$$

Es decir, $\left\langle \hat{H}_1 \right\rangle$ se reduce a la suma de los valores esperados de los hamiltonianos individuales $\hat{H}_0(\mathbf{r}_k)$, calculados con la función de onda individual de cada electrón. De manera similar se obtiene

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{H}_2 \right\rangle = \left\langle \Psi \mid \hat{H}_2 \mid \Psi \right\rangle &= \sum_{k<l} \sum_P (-1)^{r_P} \left\langle \Phi \mid V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l)\hat{P} \mid \Phi \right\rangle \\ &= \sum_{k<l} \left\langle \Phi \mid V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l)\left(1 - \hat{P}_{kl}\right) \mid \Phi \right\rangle, \end{aligned} \tag{XVII.131}$$

es decir,

$$\left\langle \hat{H}_2 \right\rangle = \sum{}' \left[\langle kl \mid V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) \mid kl\rangle - \langle kl \mid V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) \mid lk\rangle\right], \tag{XVII.132}$$

donde la suma corre sobre todas las parejas de estados k y l $(k \neq l)$ que se puedan construir a partir de los N electrones. El primer término del lado derecho de esta expresión corresponde al valor promedio de la interacción con respecto al estado $|kl\rangle$, mientras que el segundo es el término de intercambio. La expresión (XVII.132) también puede escribirse alternativamente como

$$\left\langle \hat{H}_2 \right\rangle = \tfrac{1}{2} \sum_k \sum_{l \neq k} \left[\langle kl \mid V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) \mid kl\rangle - \langle kl \mid V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) \mid lk\rangle\right]. \tag{XVII.133}$$

Finalmente, la energía del sistema, E, se obtiene de sustituir (XVII.130) y (XVII.132) en (XVII.129).

Por otro lado, multiplicando la ecuación de Hartree-Fock, ecuación (T17.34),

$$\hat{H}_0\left(\mathbf{r}_k\right)|k\rangle + \sum_{l \neq k} \langle l \mid V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) \mid l\rangle\, |k\rangle - \sum_{l \neq k} \langle l \mid V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) \mid k\rangle\, |l\rangle = E_k\, |k\rangle, \tag{XVII.134}$$

por $\varphi(\mathbf{r}_k)$, sumando sobre todas las k e integrando, resulta que

$$\sum_k \left\langle k \left| \hat{H}_0(\mathbf{r}_k) \right| k \right\rangle + \sum_k \sum_{l \neq k} \langle kl \,|V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l)\,| \, lk\rangle - \sum_k \sum_{l \neq k} \langle kl \,|V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l)\,| \, kl\rangle = \sum_k E_k. \tag{XVII.135}$$

Comparando esta expresión con las ecuaciones (XVII.130) y (XVII.133) se obtiene

$$\sum_k E_k = \left\langle \hat{H}_1 \right\rangle + 2 \left\langle \hat{H}_2 \right\rangle = E + \left\langle \hat{H}_2 \right\rangle, \tag{XVII.136}$$

lo que da para la energía del sistema la expresión

$$E = \sum_k E_k - \left\langle \hat{H}_2 \right\rangle. \tag{XVII.137}$$

Sustituyendo aquí la expresión (XVII.133) resulta finalmente

$$E = \sum_k E_k - \tfrac{1}{2} \sum_k \sum_{l \neq k} \left[\langle kl \mid V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) \mid kl \rangle - \langle kl \mid V(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) \mid lk \rangle \right], \tag{XVII.138}$$

que es el resultado solicitado.[2]

* **XVII.9** Determine las fuerzas de van der Waals entre dos moléculas neutras simples mediante un cálculo perturbativo a segundo orden empleando el hamiltoniano (T17.15). *Sugerencia*: el cálculo exacto es complicado; en su lugar, haga una estimación del resultado sustituyendo el denominador variable de la suma que da la energía de interacción por una constante apropiadamente elegida.

Cuando dos moléculas neutras son vecinas una de otra, aparecen fuerzas de interacción debidas al acoplamiento de sus multipolos. La energía potencial de estas interacciones decrece con relativa lentitud con la distancia intermolecular R, y sucede que cuando tales distancias son relativamente grandes, estas fuerzas resultan atractivas. A estas fuerzas se les conoce como *fuerzas de van der Waals*.

Para simplificar el estudio de la interacción de dos moléculas neutras nos concretaremos al caso más sencillo, el de la interacción de dos átomos de hidrógeno, considerando a los núcleos en reposo y despreciando los efectos del acoplamiento espín-órbita. Los dos núcleos atómicos los denotaremos con A y B, y supondremos que se encuentran separados una distancia R sobre el eje Oz de un sistema de referencia; denotaremos con $\mathbf{r}_1$ y $\mathbf{r}_2$ las coordenadas de posición de los electrones respecto a su propio núcleo, con r_{12} la distancia entre los dos electrones y con r_{1B}, r_{2A} la distancia de un electrón al núcleo del otro átomo.

Con esta notación y aproximación, el hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \tag{XVII.139}$$

donde $\hat{H}_0$ es el hamiltoniano de los electrones independientes

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_1^2 + \nabla_2^2\right) - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} \tag{XVII.140}$$

[2] Por un error de captura, en la ecuación (T17.36) no aparece el último término de (XVII.138).

y $\hat{H}'$ el hamiltoniano de las interacciones coulombianas entre las partículas,

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}}. \tag{XVII.141}$$

Si la distancia R entre los dos núcleos (es decir, entre los átomos) es muy grande comparada con el radio de Bohr a_0, $R \gg a_0$, podemos considerar $\hat{H}'$ como una perturbación. El estado base del hamiltoniano no perturbado $\hat{H}_0$ está descrito entonces por la función de onda

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\,\psi_{100}(\mathbf{r}_2), \tag{XVII.142}$$

donde $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ denota las eigenfunciones del átomo de hidrógeno.

Con la geometría propuesta se tiene, por ejemplo, que

$$r_{1B}^2 = R^2 + r_1^2 - 2Rz_1, \tag{XVII.143}$$

o bien, que

$$r_{1B} = R\left(1 - \frac{2z_1}{R} + \frac{r_1^2}{R^2}\right)^{1/2}, \tag{XVII.144}$$

y así sucesivamente. Dado que estamos interesados sólo en los términos dominantes de la energía de interacción, podemos usar estas expresiones para desarrollar $\hat{H}'$ en serie de potencias de R^{-1} y restringirnos a los términos de orden más bajo. Se obtiene así que

$$\begin{aligned}
\hat{H}' &= \frac{e^2}{R}\left\{1 + \left(1 + \frac{2(z_2 - z_1)}{R} + \frac{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}{R^2}\right)^{-\frac{1}{2}}\right. \\
&\quad \left. - \left(1 - \frac{2z_1}{R} + \frac{r_1^2}{R^2}\right)^{-\frac{1}{2}} - \left(1 + \frac{2z_2}{R} + \frac{r_2^2}{R^2}\right)^{-\frac{1}{2}}\right\} \\
&\approx \frac{e^2}{R^3}(x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2).
\end{aligned} \tag{XVII.145}$$

Este desarrollo incluye los términos que describen la energía de interacción entre los dos dipolos eléctricos instantáneos asociados a la configuración momentánea de los átomos. Los términos ignorados, del orden de $1/R^4$ y $1/R^5$, corresponden a las interacciones dipolo-cuadrupolo y cuadrupolo-cuadrupolo. En otras palabras, la ecuación (XVII.145) permite determinar las fuerzas de van der Waals debidas a la interacción dipolar eléctrica entre los átomos.[3]

El valor esperado de $\hat{H}'$ en el estado base (XVII.142) es nulo, pues Ψ_0 es una función par en $\mathbf{r}_1$ y $\mathbf{r}_2$, mientras que $\hat{H}'$ es impar en estas variables. Debido a esto se hace necesario calcular a segundo orden de la teoría de perturbaciones

[3]El punto de vista adoptado es característico y legítimo dentro de la interpretación de ensamble de la mecánica cuántica, que identifica en todo momento a los electrones con corpúsculos localizados, aunque sujetos a un movimiento orbital azaroso, cuya estadística está descrita por la función de onda. El tema se discute con mayor amplitud en el texto. Dentro de la interpretación de Copenhague, que ve al electrón como una nube esencialmente estática alrededor del núcleo, es necesario introducir fluctuaciones cuánticas en la distribución de carga de estas nubes, cuyos momentos dipolares son los que se acoplan.

para determinar las correcciones a la energía. Por lo tanto, escribimos la energía de interacción entre los dos átomos de hidrógeno en la forma

$$E'(R) = -\sum_{n\neq 0} \frac{\left|\left\langle n \mid \hat{H}' \mid 0\right\rangle\right|^2}{E_n - E_0}. \tag{XVII.146}$$

Esta energía de interacción siempre es negativa, ya que cada sumando es positivo. Esto significa que la interacción dipolar de los dos átomos de hidrógeno es atractiva y proporcional a $1/R^6$ para R grande ($R \gg a_0$), según sigue de (XVII.145).

Dado que el cálculo con (XVII.146) es muy complicado, haremos una aproximación que permite obtener una cota mínima para el valor de la energía de interacción; la aproximación consiste en substituir las E_n del denominador de la expresión (XVII.146) por E_1, la energía del primer estado excitado del átomo de hidrógeno; como $E_1 < E_n$ para $n \geq 2$, se tiene que

$$\begin{aligned} E' &= -\sum_{n\neq 0} \frac{\left|\left\langle n \mid \hat{H}' \mid 0\right\rangle\right|^2}{E_n - E_0} \geq -\sum_{n\neq 0} \frac{\left|\left\langle n \mid \hat{H}' \mid 0\right\rangle\right|^2}{E_1 - E_0} \\ &= -\frac{1}{E_1 - E_0} \sum_{n\neq 0} \left|\left\langle n \mid \hat{H}' \mid 0\right\rangle\right|^2. \end{aligned} \tag{XVII.147}$$

Como (cf. ecuación (VIII.54))

$$\begin{aligned} \sum_{n\neq 0} \left|\left\langle n \mid \hat{H}' \mid 0\right\rangle\right|^2 &= \sum_{n} \left\langle 0 \mid \hat{H}' \mid n\right\rangle \left\langle n \mid \hat{H}' \mid 0\right\rangle - \left|\left\langle 0 \mid \hat{H}' \mid 0\right\rangle\right|^2 \\ &= \left\langle 0 \mid \hat{H}'^2 \mid 0\right\rangle - \left\langle 0 \mid \hat{H}' \mid 0\right\rangle^2, \end{aligned}$$

se obtiene

$$E' \geq -\frac{1}{E_1 - E_0} \left\langle 0 \mid \hat{H}'^2 \mid 0\right\rangle. \tag{XVII.148}$$

Por tratarse de dos átomos de hidrógeno, debemos tomar $E_0 = -e^2/a_0$, $E_1 = -e^2/4a_0$ y $E_1 - E_0 = 3e^2/4a_0$, lo que da

$$E' \geq -\frac{4a_0}{3e^2} \left\langle 0 \mid \hat{H}'^2 \mid 0\right\rangle. \tag{XVII.149}$$

Por otra parte, de (XVII.145) sigue que

$$\hat{H}'^2 = \frac{e^4}{R^6} \left(x_1^2 x_2^2 + y_1^2 y_2^2 + 4z_1^2 z_2^2 + 2x_1 x_2 y_1 y_2 - 4x_1 x_2 z_1 z_2 - 4y_1 y_2 z_1 z_2\right).$$

El valor esperado sobre el estado base (par) de los términos cruzados como $x_1 x_2 y_1 y_2$ es cero, por tratarse de funciones impares. Por otro lado, cada uno de los términos cuadráticos de la forma $x_1^2 x_2^2$ da una contribución idéntica, por tratarse de un estado con simetría esférica; además, $\langle x_1^2 x_2^2\rangle = \langle x_1^2\rangle \langle x_2^2\rangle$, etc.. Como

$$\begin{aligned} \langle x_1^2\rangle &= \int x^2 \left|\psi_{100}(\mathbf{r})\right|^2 d^3r = \tfrac{1}{3} \int r^2 \left|\psi_{100}(\mathbf{r})\right|^2 d^3r \\ &= \frac{1}{3\pi a_0^3} \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} 4\pi r^2 dr = a_0^2, \end{aligned} \tag{XVII.150}$$

resulta simplemente

$$\left\langle 0 \mid \hat{H}'^2 \mid 0 \right\rangle = \frac{e^4}{R^6} 6 \left\langle z_1^2 z_2^2 \right\rangle = \frac{6e^4 a_0^4}{R^6}. \tag{XVII.151}$$

Sustituyendo este resultado en (XVII.149) se obtiene finalmente la cota buscada para la energía de van der Waals:

$$E' \geq -\frac{8e^2 a_0^5}{R^6}. \tag{XVII.152}$$

La fuerza asociada a esta energía, $-\partial E'/\partial R$, decrece como R^{-7} y es atractiva. En la sección 17.2 del texto se calcula esta misma energía con el método variacional; se obtiene una expresión similar a la anterior, pero con el factor 8 sustituido por 6. Como ahí se explica, una mejor aproximación lleva el coeficiente $6.47\ldots$ Esto hace ver que el error cometido con la sustitución $E_n \to E_1$, aunque apreciable, no invalida el contenido cualitativo del cálculo.

Una posibilidad para mejorar el cálculo consiste en definir una energía media $\bar{E}$ mediante la sustitución

$$\sum_{n\neq 0} \frac{\left|\left\langle n \mid \hat{H}' \mid 0 \right\rangle\right|^2}{E_n - E_0} \equiv \frac{1}{\overline{E} - E_0} \sum_{n\neq 0} \left|\left\langle n \mid \hat{H}' \mid 0 \right\rangle\right|^2 = \frac{6e^4 a_0^4}{R^6} \frac{1}{\overline{E} - E_0}, \tag{XVII.153}$$

de donde sigue que

$$\overline{E} = E_0 + \frac{6e^4 a_0^4}{R^6} S^{-1}, \quad S = \sum_{n\neq 0} \frac{\left|\left\langle n \mid \hat{H}' \mid 0 \right\rangle\right|^2}{E_n - E_0}. \tag{XVII.154}$$

En las aplicaciones se buscaría algún método específico para determinar S, muy probablemente numérico.

XVII.10 Demuestre que una pertubación adiabática produce transiciones periódicas en un sistema que posee dos estados degenerados.

Denotaremos con $\psi_A^{(0)}$ y $\psi_B^{(0)}$ las funciones de onda degeneradas del sistema no perturbado y supondremos que en $t = 0$, momento en que se aplica la perturbación adiabática con hamiltoniano $\hat{H}'(t)$, el sistema se encuentra en el estado A. Nos proponemos calcular la probabilidad de que el sistema realice una transición al estado B como resultado de la perturbación.

Si la perturbación es pequeña, todos los elementos de matriz $\hat{H}'_{mn}$, con $m \neq n$, son pequeños en comparación con $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$, a excepción de los elementos de matriz $\hat{H}'_{AB}$ y $\hat{H}'_{BA}$, para los cuales $E_A^{(0)} - E_B^{(0)} = 0$. Esto nos permite aproximar todos los coeficientes $c_m(t)$ de la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo por cero, excepto $c_A(t)$ y $c_B(t)$, los cuales quedan dados por las expresiones usuales, ecuación (T17.42),

$$\frac{dc_A(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[c_A(t)\left\langle A \mid \hat{H}' \mid A \right\rangle + c_B(t)\left\langle A \mid \hat{H}' \mid B \right\rangle\right], \tag{XVII.155}$$

$$\frac{dc_B(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[c_A(t)\left\langle B \mid \hat{H}' \mid A \right\rangle + c_B(t)\left\langle B \mid \hat{H}' \mid B \right\rangle\right]. \tag{XVII.156}$$

Para simplificar el álgebra sin alterar la esencia del problema, supondremos que se cumple que

$$\left\langle A \mid \hat{H}' \mid A \right\rangle = \left\langle B \mid \hat{H}' \mid B \right\rangle \equiv H'_{AA}, \tag{XVII.157}$$

$$\left\langle A \mid \hat{H}' \mid B \right\rangle = \left\langle B \mid \hat{H}' \mid A \right\rangle \equiv H'_{AB}. \tag{XVII.158}$$

Con esta simplificación las ecuaciones de evolución toman la forma

$$\frac{dc_A(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[c_A(t)H'_{AA} + c_B(t)H'_{AB}\right], \tag{XVII.159}$$

$$\frac{dc_B(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[c_A(t)H'_{AB} + c_B(t)H'_{AA}\right]. \tag{XVII.160}$$

Sumando y restando estas expresiones se obtiene

$$\frac{d}{dt}\left[c_A(t) + c_B(t)\right] = -\frac{i}{\hbar}\left[c_A(t) + c_B(t)\right]\left[H'_{AA} + H'_{AB}\right], \tag{XVII.161}$$

$$\frac{d}{dt}\left[c_A(t) - c_B(t)\right] = -\frac{i}{\hbar}\left[c_A(t) - c_B(t)\right]\left[H'_{AA} - H'_{AB}\right]. \tag{XVII.162}$$

Para integrar estas ecuaciones tomamos en cuenta que la perturbación es adiabática, lo que significa que los elementos de matriz H'_{AA} y H'_{AB} varían muy lentamente con el tiempo y pueden tomarse como constantes en primera aproximación. Esto da

$$\left[c_A(t) + c_B(t)\right] = a\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(H'_{AA} + H'_{AB})t\right]. \tag{XVII.163}$$

$$\left[c_A(t) - c_B(t)\right] = b\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(H'_{AA} - H'_{AB})t\right]. \tag{XVII.164}$$

Sumando y restando nuevamente se obtiene

$$c_A(t) = \frac{1}{2}\left\{a\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(H'_{AA} + H'_{AB}\right)t\right] + b\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(H'_{AA} - H'_{AB}\right)t\right]\right\}, \tag{XVII.165}$$

$$c_B(t) = \frac{1}{2}\left\{a\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(H'_{AA} + H'_{AB}\right)t\right] - b\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(H'_{AA} - H'_{AB}\right)t\right]\right\}. \tag{XVII.166}$$

De las condiciones iniciales $c_A(0) = 1$ y $c_B(0) = 0$ sigue que $a = b = 1$, lo que da finalmente

$$c_A(t) = \cos\left(\frac{H'_{AB}}{\hbar}t\right)e^{-\frac{i}{\hbar}H'_{AA}t} \tag{XVII.167}$$

y

$$c_B(t) = -i\,\mathrm{sen}\left(\frac{H'_{AB}}{\hbar}t\right)e^{-\frac{i}{\hbar}H'_{AA}t}. \tag{XVII.168}$$

Las probabilidades de que el sistema esté en el estado A o en el estado B en el tiempo t son

$$w_{AA} \equiv w_A = |c_A(t)|^2 = \cos^2\frac{H'_{AB}}{\hbar}t, \tag{XVII.169}$$

$$w_{AB} \equiv w_B = 1 - w_A = |c_B(t)|^2 = \mathrm{sen}^2\frac{H'_{AB}}{\hbar}t, \tag{XVII.170}$$

respectivamente. Vemos que ambas probabilidades varían periódicamente entre los valores 0 y 1 en el curso del tiempo, es decir, que ocurren transiciones periodicas entre los dos estados degenerados. La frecuencia de estas transiciones es $\omega_{AB} = H'_{AB}/\hbar$ y queda determinada por el acoplamiento entre los dos estados degenerados producido por la perturbación. Para perturbaciones muy débiles y tiempos pequeños comparados con ω_{AB}^{-1}, se puede escribir

$$w_A = 1, \quad w_B = \left(\frac{H'_{AB}}{\hbar}\right)^2 t^2, \tag{XVII.171}$$

lo que muestra que el sistema prácticamente no responde al inicio de la perturbación, pues $w_B \ll 1$; sin embargo, si la perturbación persiste, llegará en todo caso un momento en que $\omega_{AB}t \sim 1$, cuando la probabilidad w_B alcanza un valor comparable con la unidad. En otras palabras, por débil que sea una perturbación adiabática, si dura lo suficiente logra que se pueblen todos los estados degenerados (o casi degenerados) que conecta.

XVII.11 Demuestre que si a un sistema que se encuentra en su estado base se le aplica la perturbación impulsiva $V(t) = \hat{A}\delta(t)$, la probabilidad de que se produzca una transición a cualquier estado excitado es

$$w = \frac{1}{\hbar^2}\left(\langle 0 \mid A^2 \mid 0\rangle - \langle 0 \mid A \mid 0\rangle^2\right).$$

La probabilidad de que ocurra una transición del estado estacionario n al estado estacionario k durante el tiempo que dura una perturbación V, está dada a primer orden de la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo por la ecuación (T17.49),

$$w_{nk} = \left|C_{nk}^{(1)}(\infty)\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\infty e^{i\omega_{kn}t} V_{kn}(t)\, dt\right|^2, \tag{XVII.172}$$

en donde, como es usual, se ha escrito

$$\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar}, \tag{XVII.173}$$

$$V_{kn}(t) = \langle k \mid V(t) \mid n\rangle. \tag{XVII.174}$$

Como en el presente caso la perturbación aplicada al sistema está dada por $V(t) = \hat{A}\delta(t)$, se tiene

$$V_{kn}(t) = \delta(t)\left\langle k \mid \hat{A} \mid n\right\rangle. \tag{XVII.175}$$

Para evitar indeterminaciones en el valor de la integral se supondrá que la perturbación se aplica a un tiempo ε positivo, pero infinitamente pequeño. De la expresión (XVII.172) sigue entonces que la probabilidad de que se produzca una transición del estado base a algún estado excitado k es

$$\begin{aligned} w_{0k} &= \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\infty e^{i\omega_{k0}t}\delta(t-\varepsilon)\left\langle k \mid \hat{A} \mid 0\right\rangle dt\right|^2 \\ &\simeq \frac{1}{\hbar^2}\left|\left\langle k \mid \hat{A} \mid 0\right\rangle\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left\langle 0 \mid \hat{A} \mid k\right\rangle\left\langle k \mid \hat{A} \mid 0\right\rangle. \end{aligned} \tag{XVII.176}$$

La probabilidad de que la transición sea a cualquier estado excitado k es la suma de todas las probabilidades anteriores para $k \neq 0$, es decir,

$$w = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{k \neq 0} \left\langle 0 \mid \hat{A} \mid k \right\rangle \left\langle k \mid \hat{A} \mid 0 \right\rangle, \tag{XVII.177}$$

que da, usando la relación de completez, el resultado solicitado:

$$w = \frac{1}{\hbar^2} \left(\left\langle 0 \mid \hat{A}^2 \mid 0 \right\rangle - \left\langle 0 \mid \hat{A} \mid 0 \right\rangle^2 \right). \tag{XVII.178}$$

XVII.12 Un oscilador armónico en su estado base es perturbado por la aplicación repentina de un campo eléctrico externo uniforme de intensidad $\mathcal{E}$ (no necesariamente pequeña), que permanece constante a partir de ese momento. Demuestre que la probabilidad de transición al estado excitado n está dada por la distribución de Poisson

$$W_{0n} = \frac{\xi_0^{2n}}{2^n n!} e^{-\xi_0^2/2},$$

donde $\xi_0 = x_0/\sqrt{\hbar/m\omega}$ y $x_0 = e\mathcal{E}/m\omega^2$. Determine el valor medio de n.

Como se considera la posibilidad de que $\mathcal{E}$ no sea pequeña, se hace necesario utilizar un método no perturbativo para la solución de este problema. Llamaremos $t = 0$ al momento en que se conecta el campo; para $t \leq 0$ la función de onda es (con $\alpha_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$)

$$\psi = \psi_0(x) e^{-iE_0 t/\hbar}, \quad \psi_0(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\alpha_0} \right)^{1/2} e^{-x^2/2\alpha_0^2}, \quad E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega. \tag{XVII.179}$$

Esta función de onda sigue siendo efectiva para $t = +0$, pues el oscilador no puede cambiar su estado repentinamente. Pero a partir de $t = 0$ el hamiltoniano ha cambiado por la cantidad $-e\mathcal{E}x$, por lo que la posición de equilibrio del oscilador se ha desplazado del origen al punto $x_0 = e\mathcal{E}/m\omega^2$, como se demuestra en la sección 14.2 del texto, ecuación (T14.29). Luego las nuevas funciones propias son $\psi_n(x - x_0)$; ellas constituyen una base apropiada para describir el estado del oscilador a partir de la aplicación de la perturbación. En particular, para $t = +0$ podemos escribir

$$\psi_0(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x - x_0). \tag{XVII.180}$$

Para $t > 0$ la función de onda es

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x - x_0) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \tfrac{1}{2}\right) - \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}. \tag{XVII.181}$$

La probabilidad de que el oscilador esté en el estado n al tiempo $t > 0$, es

$$w_n = |c_n|^2, \tag{XVII.182}$$

por lo que sólo nos resta determinar los coeficientes c_n del desarrollo. Tenemos, con $\xi = x/\alpha_0$, $\xi_0 = x_0/\alpha_0$,

$$\begin{aligned} c_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x) \psi_n^*(x - x_0) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi 2^n n!}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \tfrac{1}{2} \left[-\xi^2 - (\xi - \xi_0)^2 \right] H_n(\xi - \xi_0) d\xi. \end{aligned} \tag{XVII.183}$$

De aquí sigue, con un cambio de variable, que

$$\sqrt{\pi 2^n n!}c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\tfrac{1}{2}\left[-(y+\xi_0)^2 - y^2\right] H_n(y)dy. \tag{XVII.184}$$

Esta integral fue evaluada (salvo por un cambio menor de signo) en el problema XI.9 utilizando la función generadora de los polinomios de Hermite; se obtiene

$$c_n = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\xi_0^2/4}\xi_0^n. \tag{XVII.185}$$

Por lo tanto, la probabilidad del estado n para el tiempo t es

$$w_n = \frac{e^{-\xi_0^2/2}}{2^n n!}\xi_0^{2n}. \tag{XVII.186}$$

Esta probabilidad tiene la forma que corresponde a una distribución de Poisson, cuya forma general es

$$w(n) = \frac{e^{-\bar{n}}}{n!}\left(\bar{n}\right)^n. \tag{XVII.187}$$

Comparando se obtiene para el valor medio de n

$$\bar{n} = \tfrac{1}{2}\xi_0^2 = \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\hbar\omega^3}. \tag{XVII.188}$$

En particular, la probabilidad de que el oscilador permanezca en su estado base es $w_0 = e^{-\xi_0^2/2}$, cantidad que para campos suficientemente intensos, tales que $\xi_0 \gg 1$, es decir, $\mathcal{E} \gg \sqrt{m\hbar\omega^3}/e_0$, resulta sumamente pequeña. En este caso se tiene $\bar{n} \gg 1$, y como la excitación de los niveles con $n \approx \bar{n} \gg 1$ es muy alta, conforme el valor de $\bar{n}$ sea mayor, más agudo será el máximo de la distribución. Concluimos que los osciladores se encontrarán dominantemente en la región de energías

$$E_{\bar{n}} \simeq \hbar\omega\bar{n} = \frac{1}{2m}\left(\frac{e\mathcal{E}}{\omega}\right)^2. \tag{XVII.189}$$

Para $\bar{n} \gg 1$ podemos considerar a estos osciladores en un régimen semiclásico, en el que su energía media es $\frac{1}{2}m\omega^2a^2$, con a la amplitud de la oscilación. Igualando se obtiene

$$a = \frac{e_0\mathcal{E}}{m\omega^2} = |x_0|, \tag{XVII.190}$$

es decir, la amplitud media de las oscilaciones resulta igual a la magnitud del desplazamiento x_0 del punto de equilibrio. Esto mismo es lo que le sucede a un oscilador clásico inicialmente en reposo; en el presente caso, se partió de su equivalente, el estado base (véase el problema XIV.4).

En el caso de perturbaciones muy débiles se obtiene $\bar{n} \ll 1$, y la w_n se puede aproximar como

$$w_n \simeq \frac{\xi_0^{2n}}{2^n n!} = \frac{(\bar{n})^n}{n!}, \tag{XVII.191}$$

que es una función que decrece muy rápido con n, por lo que sólo la probabilidad de transición al primer estado excitado llega a ser apreciable, $w_1 = \bar{n} \ll 1$; la gran mayoría de los osciladores del ensemble tenderán a permanecer en el estado base.

XVII.13 Un sistema físico que posee sólo los estados $|1\rangle$ y $|2\rangle$, degenerados y ortogonales, es perturbado por la acción de un potencial V que se aplica en el intervalo $(0, T)$. Suponiendo (para simplificar) que los elementos de matriz de V son $V_{11} = V_{22} = 0$, $V_{12} = V_{21} = V_0$, determine exactamente la probabilidad de la transición del estado $|1\rangle$ al $|2\rangle$, sabiendo que el sistema se encontraba inicialmente en el estado $|1\rangle$. Determine después esta probabilidad a primer orden de la teoría de perturbaciones y compare los resultados. ¿Cuándo es válida la solución perturbativa?

La primera parte de este problema es muy similar al problema XVII.10, y los resultados obtenidos allá son aplicables aquí; sin embargo, se repetirá el cálculo para insistir en su carácter exacto. Escribimos el hamiltoniano en la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V,$$

con V la perturbación. Nos interesan las soluciones de la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H}\psi = \left(\hat{H}_0 + V\right)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{XVII.192}$$

Como por hipótesis el sistema posee sólo dos eigenestados de $\hat{H}_0$, que llamaremos $|1\rangle$ y $|2\rangle$, con eigenvalor común E podemos expresar $|\psi\rangle$ como la superposición

$$|\psi(x,t)\rangle = a_1(t)\,|1\rangle + a_2(t)\,|2\rangle\,, \tag{XVII.193}$$

donde los coeficientes del desarrollo son funciones del tiempo. Es conveniente factorizar en la forma

$$\begin{aligned} a_i(t) &= c_i(t)e^{-iEt/\hbar}, \\ \psi(x,t) &= \left[c_1(t)\,|1\rangle + c_2(t)\,|2\rangle\right]e^{-iEt/\hbar}, \end{aligned} \tag{XVII.194}$$

pues, en ausencia de perturbaciones, ambos coeficientes c_i serían constantes, lo que significa que en presencia de perturbaciones moderadas variarán lentamente con el tiempo. Sustituyendo en (XVII.192) se obtiene, tomando en cuenta que $\hat{H}_0\psi = E\psi$,

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi &= E\left(c_1(t)\,|1\rangle + c_2(t)\,|2\rangle\right)e^{-iEt/\hbar} + V\left(c_1(t)\,|1\rangle + c_2(t)\,|2\rangle\right)e^{-iEt/\hbar} \\ &= i\hbar\left(\frac{dc_1}{dt}\,|1\rangle + \frac{dc_2}{dt}\,|2\rangle\right)e^{-iEt/\hbar} + E\left(c_1(t)\,|1\rangle + c_2(t)\,|2\rangle\right)e^{-iEt/\hbar}, \end{aligned}$$

o, simplificando,

$$i\hbar\left(\frac{dc_1}{dt}\,|1\rangle + \frac{dc_2}{dt}\,|2\rangle\right) = V\left(c_1(t)\,|1\rangle + c_2(t)\,|2\rangle\right). \tag{XVII.195}$$

Tomando elementos de matriz de esta expresión con $\langle 1|$ y $\langle 2|$ sucesivamente, se obtiene

$$i\hbar\frac{dc_1}{dt} = c_1(t)\,\langle 1 \mid V \mid 1\rangle + c_2(t)\,\langle 1 \mid V \mid 2\rangle\,, \tag{XVII.196}$$

$$i\hbar\frac{dc_2}{dt} = c_1(t)\,\langle 2 \mid V \mid 1\rangle + c_2(t)\,\langle 2 \mid V \mid 2\rangle\,. \tag{XVII.197}$$

Por hipótesis $\langle 1 \mid V \mid 1\rangle = \langle 2 \mid V \mid 2\rangle = 0$ y $\langle 1 \mid V \mid 2\rangle = \langle 2 \mid V \mid 1\rangle = V_0$, con lo que las expresiones anteriores se reducen al sistema de ecuaciones acopladas

$$i\hbar\frac{dc_1}{dt} = c_2(t)\,V_0, \quad i\hbar\frac{dc_2}{dt} = c_1(t)\,V_0. \tag{XVII.198}$$

Sumando y restando estas expresiones e integrando, se obtiene

$$c_1 + c_2 = Ae^{-iV_0t/\hbar}, \quad c_1 - c_2 = Be^{iV_0t/\hbar}. \tag{XVII.199}$$

Al integrar se supuso que V_0 es constante; en caso de tratarse de una función del tiempo habría que hacer la sustitución $V_0t \to \int^t V_0(s)ds$. De aquí sigue que

$$c_1(t) = \tfrac{1}{2}Ae^{-iV_0t/\hbar} + \tfrac{1}{2}Be^{iV_0t/\hbar}, \tag{XVII.200}$$

$$c_2(t) = \tfrac{1}{2}Ae^{-iV_0t/\hbar} - \tfrac{1}{2}Be^{iV_0t/\hbar}. \tag{XVII.201}$$

Introduciendo las condiciones iniciales $c_1(0) = 1$ y $c_2(0) = 0$, se obtiene $A = B = 1$, con lo cual queda

$$c_1(t) = \cos\frac{V_0t}{\hbar}, \tag{XVII.202}$$

$$c_2(t) = -i\,\mathrm{sen}\,\frac{V_0t}{\hbar}. \tag{XVII.203}$$

La solución de la ecuación de Schrödinger resulta así

$$\psi(x,t) = \left(\cos\frac{V_0t}{\hbar}\,|1\rangle - i\,\mathrm{sen}\,\frac{V_0t}{\hbar}\,|2\rangle\right)e^{-iEt/\hbar}. \tag{XVII.204}$$

La probabilidad de la transición del estado $|1\rangle$ al $|2\rangle$ es

$$w_{12}(t) = \mathrm{sen}^2\,\frac{V_0t}{\hbar}, \tag{XVII.205}$$

mientras que la probabilidad de que el sistema permanezca en el estado inicial es

$$w_{11}(t) = \cos^2\frac{V_0t}{\hbar}. \tag{XVII.206}$$

Apliquemos ahora la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo a primer orden. Partimos del sistema de ecuaciones (T17.42), que en el presente caso se escribe en la forma

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t) = \sum_{k=1}^{2} c_k(t)\,V_{nk}. \tag{XVII.207}$$

Como en $t = 0$ el sistema se encuentra en el estado $|1\rangle$, se tiene $c_n^{(1)}(0) = \delta_{n1}$; si la perturbación es pequeña o los tiempos son suficientemente cortos como para considerar que todos los coeficientes c_m son pequeños, excepto c_1, el sistema anterior se reduce a primer orden a

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_1^{(1)}(t) = V_{11}c_1^{(1)}, \tag{XVII.208}$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_2^{(1)}(t) = V_{21}c_1^{(1)}. \tag{XVII.209}$$

Integrando,

$$c_n^{(1)}(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t V_{11}(s)ds\right] \approx 1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t V_{11}(s)ds, \tag{XVII.210}$$

$$c_2^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int^t V_{21}(s)ds = -\frac{i}{\hbar}V_0t \text{ para } V_{21} = V_0 = \text{const.} \tag{XVII.211}$$

Si aquí ponemos V_{11}=0, resulta $w_{11}^{(1)}=\left|c_n^{(1)}(t)\right|^2=1$ para toda t, por lo que se hace necesario recurrir a un cálculo a orden mayor. Sin embargo, los resultados anteriores son correctos hasta primer orden, y corresponden a los primeros términos del desarrollo en serie de las soluciones exactas, ecuaciones (XVII.202) y (XVII.203). Es claro que el resultado perturbativo puede aplicarse sólo a tiempos pequeños, tales que $\left|\int^t V_{21}(s)ds\right| \ll \hbar$.

XVII.14 Calcule detalladamente el coeficiente B de Einstein para procesos de absorción resonante y muestre que se satisface la relación de Einstein $B_{nk} = B_{kn}$.

El problema se puede resolver siguiendo exactamente los pasos utilizados en la sección 17.5 del texto para determinar el coeficiente B de Einstein para emisiones inducidas. Como lo que cambia es el signo de ω en la ecuación (T17.78) al tomar $\mathbf{A}_-$ en vez de $\mathbf{A}_+$, a la vez que se intercambian los estados atómicos inicial y final —cambios a los que es insensible la ecuación (T17.85) que determina la probabilidad de transición y de ahí el correspondiente coeficiente de Einstein—, se concluye que debe cumplirse que $B_{nm} = B_{mn}$. Para un análisis más formal, basta proceder como sigue: La probabilidad de una transición atómica dipolar del estado n al estado m, por unidad de tiempo, en cualquier dirección y con cualquier polarización de la radiación (de frecuencia $\omega = \omega_{nm}$) emitida, está dada por la ecuación (T17.89), y es

$$W_{nm} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2}\rho\left(\omega\right)\left|\langle n \mid \mathbf{r} \mid m\rangle\right|^2, \tag{XVII.212}$$

donde $\rho(\omega)$ representa la densidad espectral del campo en el que el átomo se encuentra inmerso. Ahora bien, de la teoría del capítulo 9 del texto sigue que para transiciones inducidas se puede escribir

$$W_{nm} = B_{nm}\rho\left(\omega_{nm}\right), \tag{XVII.213}$$

de donde sigue

$$B_{nm} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2}\left|\langle n \mid \mathbf{r} \mid m\rangle\right|^2. \tag{XVII.214}$$

De aquí es claro que

$$B_{mn} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2}\left|\langle m \mid \mathbf{r} \mid n\rangle\right|^2; \tag{XVII.215}$$

pero

$$\left|\langle n \mid \mathbf{r} \mid m\rangle\right|^2 = \langle m \mid \mathbf{r} \mid n\rangle\langle n \mid \mathbf{r} \mid m\rangle = \langle n \mid \mathbf{r} \mid m\rangle\langle m \mid \mathbf{r} \mid n\rangle = \left|\langle m \mid \mathbf{r} \mid n\rangle\right|^2, \tag{XVII.216}$$

entonces

$$B_{nk} = B_{kn}. \tag{XVII.217}$$

Con el objeto de aumentar el valor didáctico del presente ejemplo, el problema se resolverá en detalle a partir de consideraciones elementales, evitando en lo posible el uso mecánico de las fórmulas del texto.

Consideremos un átomo con Z electrones y dos estados estacionarios Ψ_m^0 y Ψ_n^0 en ausencia de la perturbación, tales que $E_m > E_n$. Supondremos que en $t = 0$ el átomo está en el estado n de menor energía. A partir de $t = 0$ el sistema se somete a la influencia perturbativa de radiación electromagnética que contiene

un rango estrecho de frecuencias en la vecindad de $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$. Nos interesa calcular la probabilidad de transición al estado m como resultado de esta perturbación.

Consideremos inicialmente la componente en la dirección Ox del campo eléctrico de la radiación incidente. Más adelante tomaremos en cuenta el resto del campo. El hamiltoniano de interacción debido a esta perturbación lo podemos escribir en la aproximación dipolar (es decir, de onda larga, que se obtiene despreciando las variaciones espaciales del campo eléctrico al interior del átomo) en la forma

$$\hat{H}' = E_x \sum_j e_j x_j, \tag{XVII.218}$$

en donde e_j representa la carga y x_j la coordenada x de la j-ésima partícula. La expresión $\sum_j e_j x_j$ es la componente del momento eléctrico dipolar atómico a lo largo del eje Ox. La intensidad del campo E_x está dada en términos de sus componentes espectrales por la expresión general

$$E_x = \int E_x^0(\nu)\left(e^{i2\pi\nu t} + e^{-i2\pi\nu t}\right) d\nu. \tag{XVII.219}$$

Consideremos por el momento una sola frecuencia ν de la perturbación, aun cuando al final será necesario integrar sobre todas las frecuencias. Para aplicar la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo introducimos las condiciones iniciales $c_m(0) = 0$ y $c_n(0) = 1$ en el lado derecho de la ecuación (T17.42) (los otros coeficientes en la suma son cero) para obtener

$$\begin{aligned} \dot{c}_m(t) &= -\frac{i}{\hbar}\int \Psi_m^{0*}\hat{H}'\Psi_n^0\, dx \\ &= -\frac{i}{\hbar}\int \psi_m^{0*} e^{iE_m t/\hbar}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right) E_x \sum_j e_j x_j \psi_n^0 e^{-iE_n t/\hbar} dx. \end{aligned} \tag{XVII.220}$$

Introducimos los elementos de matriz del momento dipolar atómico, denotados con

$$(D_x)_{mn} = \int \psi_m^{0*} \sum_j e_j x_j \psi_n^0\, dx \tag{XVII.221}$$

y obtenemos

$$\frac{dc_m(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}(D_x)_{mn} E_x^0(\nu)\left[e^{i(\omega_{mn}+\omega)t} + e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}\right]. \tag{XVII.222}$$

Integrando se obtiene

$$c_m(t) = (D_x)_{mn} E_x^0(\nu)\left[\frac{1 - e^{i(\omega_{mn}+\omega)t}}{\hbar(\omega_{mn}+\omega)} + \frac{1 - e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}}{\hbar(\omega_{mn}-\omega)}\right]. \tag{XVII.223}$$

Este resultado muestra que en el caso general hay dos contribuciones, cuyo peso relativo puede variar considerablemente de caso en caso. Normalmente el coeficiente $(D_x)_{mn}E_x^0(\nu)$ es pequeño, por lo que $c_m(t)$ puede alcanzar valores significativos sólo cuando alguno de los denominadores que intervienen en la expresión (XVII.223) es a su vez pequeño; esto ocurre sólo si $\omega \sim \omega_{mn}$, o bien si $\omega \sim -\omega_{mn}$. En cada caso sólo uno de los dos términos es importante (donde el

denominador se aproxima a cero) y el otro resulta considerablemente más pequeño (con denominador grande $\simeq 2\left|\omega_{mn}\right|$). En otras palabras, la absorción inducida se presenta debido a que la presencia del *denominador de resonancia*, $\omega_{mn}-\omega$, ocasiona que la probabilidad de transición del estado n al estado m adquiera un valor máximo cuando la frecuencia de la radiación es muy cercana a la dada por la fórmula de Bohr; en este caso el segundo término es el importante y podemos despreciar el primero sin cometer un error apreciable. Para la emisión inducida se tiene $\omega_{mn}<0$, y el primer término es el que genera las transiciones resonantes, mientras que el segundo se vuelve despreciable. Ahora es fácil ver que el valor de $\left|c_m(t)\right|^2$ (que determina la probabilidad de transición y los coeficientes B de Einstein producidos por el primero o por el segundo término, según sea el caso) es igual en ambos casos para el mismo valor de $|\omega_{mn}|$; de aquí sigue la igualdad de estos coeficientes para absorción o emisión estimuladas entre una pareja dada de estados m y n.

Para completar el ejercicio calculamos la probabilidad de transición en el tiempo t. Tenemos para absorción resonante

$$W_{n\to m}=c_m^*(t)\,c_m(t)=4\,(D_x)_{mn}^2\,E_x^{02}(\nu_{mn})\int\frac{\operatorname{sen}^2\left[\pi\left(E_m-E_n+h\nu\right)t/\hbar\right]}{\left(E_m-E_n+h\nu\right)^2}d\nu. \tag{XVII.224}$$

La integral puede extenderse de $-\infty$ a ∞, considerando que el valor del integrando es muy pequeño fuera de la resonancia. Usando la fórmula

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\operatorname{sen}^2 x}{x^2}dx=\pi, \tag{XVII.225}$$

se obtiene

$$w_{n\to m}=\frac{1}{\hbar^2}\,(D_x)_{mn}^2\,E_x^{02}(\nu_{mn})\,t.$$

La probabilidad de transición por unidad de tiempo, considerando las tres componentes del campo, resulta de esta manera

$$W_{n\to m}=\lim_{t\to\infty}\frac{w_{n\to m}}{t}=\frac{1}{\hbar^2}\left[(D_x)_{mn}^2+(D_y)_{mn}^2+(D_z)_{mn}^2\right]. \tag{XVII.226}$$

Una vez más verificamos que $W_{n\to m}=W_{m\to n}$. Salvo por el factor $\rho(\omega)$ debido a la densidad espectral del campo incidente (cf. ecuación T17.90)), esta afirmación es equivalente a $B_{nm}=B_{mn}$.

Se deja al lector mostrar que de (XVII.226) sigue que

$$B_{nm}=\frac{4\pi^2}{3h^2}\left|\mathbf{D}_{mn}\right|^2. \tag{XVII.227}$$

Aspectos complementarios de este tema pueden verse en el problema XVII.17.

XVII.15 Demuestre que la probabilidad por unidad de tiempo de que un átomo realice una transición cuadrupolar espontánea entre la pareja de estados n y n' es

$$A_{nn'}^{(2e)}=\frac{\omega_{nn'}^5}{90\hbar c^5}\sum_{i,j}\left|\langle n|\,\hat{Q}_{ij}\,|n'\rangle\right|^2,$$

donde $\hat{Q}_{ij}$ son las componentes del momento cuadrupolar eléctrico:

$$\hat{Q}_{ij}=e\left(3x_ix_j-r^2\delta_{ij}\right),\quad i,j=1,2,3.$$

Determinaremos la expresión para la probabilidad de que ocurran transiciones cuadrupolares espontáneas mediante una generalización al régimen cuántico de la correspondiente fórmula clásica siguiendo un procedimiento análogo al utilizado en la sección 9.7 del texto para el tratamiento de las transiciones dipolares. En el caso clásico, la intensidad de la radiación cuadrupolar está dada por la expresión

$$W = \frac{1}{180c^5}\left(\dddot{Q}_{ij}\right)^2, \tag{XVII.228}$$

donde Q_{ij} son las componentes del tensor que representa al momento cuadrupolar eléctrico, es decir,[4]

$$Q_{ij} = e\left(3x_i x_j - r^2\delta_{ij}\right), \quad i,j = 1,2,3. \tag{XVII.229}$$

En la teoría cuántica la radiación ocurre como resultado de una transición atómica del estado cuántico n al estado cuántico n', por lo que debemos reemplazar la variable clásica Q_{ij} por su contraparte cuántica

$$Q_{ij} \to \left\langle \hat{Q}_{ij} \right\rangle = \langle \Psi | \, \hat{Q}_{ij} \, | \Psi \rangle \, . \tag{XVII.230}$$

La potencia radiada puede expresarse en términos de la probabilidad de emisión espontánea por átomo y por unidad de tiempo, dada por el coeficiente $A_{nn'}$ de Einstein, como se discute en la sección 9.7 del texto, y es

$$W = g_n g_{n'} \hbar\omega A_{nn'}, \tag{XVII.231}$$

donde los coeficientes g_n y $g_{n'}$ caracterizan la ocupación de los estados n y n'. En el presente contexto (tal y como se hizo en la sección 9.7 del texto) podemos poner $g_n g_{n'} = 1$ sin crear ningún problema, por lo que escribiremos simplemente

$$W = \hbar\omega A_{nn'}. \tag{XVII.232}$$

Combinando (XVII.231) con (XVII.228) y (XVII.230), se obtiene para el coeficiente A de Einstein para transiciones cuadrupolares eléctricas

$$A^{(2e)}_{nn'} = \frac{1}{180c^5\hbar\omega_{nn'}}\overline{\left\langle \dddot{Q}_{ij} \right\rangle^2}^t_{nn'}, \tag{XVII.233}$$

donde la barra con el índice t indica un promedio temporal.

[4]El potencial eléctrico producido por una carga e se puede desarrollar en términos de los armónicos esféricos en la forma

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} c_{lm} Q_l^m(\mathbf{r}),$$

en donde los coeficientes c_{lm} son específicos del potencial, pero las funciones $Q_l^m(\mathbf{r})$ son las mismas en todos los casos (excepto por el factor trivial e):

$$Q_l^m(\mathbf{r}) = e\sqrt{4\pi/(2l+1)}\, r^l Y_l^m(\theta,\varphi).$$

El factor numérico se escoge por conveniencia. Éste es un desarrollo en términos de los multipolos eléctricos, y Q_l^m son las componentes del multipolo de orden l. Específicamente, el momento cuadrupolar posee cinco componentes esféricas independientes ($l = 2$), que en el texto se escriben en términos de las componentes cartesianas. En el caso cuántico se introduce un operador similar, cuyos elementos de matriz en la representación de coordenadas son las funciones anteriores, multiplicadas por el factor $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Una discusión detallada puede verse en Cohen-Tannoudji (1977), Complemento E_X. Véase también la nota al pie en la página 388 del texto.

Para calcular los elementos de matriz requeridos, consideraremos que sólo los niveles n y n', con energías E_n y $E_{n'}$, respectivamente, están activos; esto equivale a utilizar el modelo de átomo de dos niveles. Como ambos estados coexisten en el ensemble, la función de onda la tomamos como una superposición de ellos

$$\Psi(t) = C_n e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n + C_{n'} e^{-iE_{n'} t/\hbar}\psi_{n'}. \tag{XVII.234}$$

Siguiendo un cálculo similar al hecho en la sección 9.7 del texto, se obtiene

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{Q}_{ij} \right\rangle &= \langle \Psi | \hat{Q}_{ij} | \Psi \rangle = |C_n|^2 \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{nn} + |C_{n'}|^2 \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{n'n'} \\ &\quad + C_n^* C_{n'} e^{i\omega t} \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{nn'} + C_{n'}^* C_n e^{-i\omega t} \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{n'n},\end{aligned} \tag{XVII.235}$$

donde se escribió

$$\omega \equiv \omega_{nn'} = (E_n - E_{n'})/\hbar.$$

Tomando en cuenta que $\left(\hat{Q}_{ij}\right)^*_{nn'} = \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{n'n}$ y que los elementos de matriz diagonales son independientes del tiempo, se obtiene de (XVII.235) que

$$\left\langle \dddot{\hat{Q}}_{ij} \right\rangle = -i\omega^3 \left[C_n^* C_{n'} e^{i\omega t} \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{nn'} - C_{n'}^* C_n e^{-i\omega t} \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{n'n} \right], \tag{XVII.236}$$

de donde sigue que

$$\begin{aligned}\left| \left\langle \dddot{\hat{Q}}_{ij} \right\rangle \right|^2 &= \omega^6 \left[|C_n|^2 |C_{n'}|^2 \left| \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{nn'} \right|^2 - C_n^2 C_{n'}^{*2} e^{-2i\omega t} \left(\hat{Q}_{ij}\right)^*_{nn'} \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{n'n} \right. \\ &\quad \left. - C_{n'} C_n^* C_n^* C_{n'} e^{2i\omega t} \left(\hat{Q}_{ij}\right)^*_{n'n} \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{nn'} + |C_n|^2 |C_{n'}|^2 \left| \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{n'n} \right|^2 \right].\end{aligned} \tag{XVII.237}$$

Como el promedio temporal de los términos que oscilan es cero, se obtiene al promediar

$$\overline{\left| \left\langle \dddot{\hat{Q}}_{ij} \right\rangle \right|^2}^t = 2\omega^6 |C_n|^2 |C_{n'}|^2 \left| \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{nn'} \right|^2. \tag{XVII.238}$$

Sustituyendo este resultado en (XVII.233) se obtiene

$$A^{(2e)}_{nn'} = \frac{\omega^5}{90\hbar c^5} |C_n|^2 |C_{n'}|^2 \left| \left(\hat{Q}_{ij}\right)_{nn'} \right|^2. \tag{XVII.239}$$

Con un argumento similar al usado en la sección 9.7 del texto, puede verse que debemos poner $|C_n|^2 |C_{n'}|^2 = 1$. La justificación firme de esta selección puede hacerse sólo a partir de la electrodinámica cuántica, por lo que el cálculo anterior debe tomarse como una guía heurística para entender la relación entre el resultado clásico y el cuántico, y para estimar el orden de magnitud de este último. Con la selección propuesta obtenemos finalmente

$$A^{(2e)}_{nn'} = \frac{\omega^5_{nn'}}{90\hbar c^5} \sum_{i,j} \left| \langle n | \hat{Q}_{ij} | n' \rangle \right|^2. \tag{XVII.240}$$

Para estimar la magnitud de esta probabilidad respecto de la de las transiciones dipolares eléctricas de frecuencia similar, notamos que en orden de magnitud (XVII.240) da

$$A^{(2e)} \sim \frac{e^2\omega^5 a_0^4}{90\hbar c^5}, \tag{XVII.241}$$

mientras que para las transiciones dipolares, usando (T9.93) debemos poner, con una aproximación similar,

$$A^{(1e)} \sim \frac{e^2\omega^3 a_0^2}{\hbar c^3}. \tag{XVII.242}$$

De aquí sigue que

$$\frac{A^{(2e)}}{A^{(1e)}} \sim \frac{a_0^2\omega^2}{90c^2} = \frac{4\pi^2}{90}\left(\frac{a_0}{\lambda}\right)^2 \sim \left(\frac{a_0}{\lambda}\right)^2, \tag{XVII.243}$$

en donde λ es la longitud de onda de la radiación emitida. Esta estimación confirma la observación hecha en la sección 17.5 del texto, en el sentido de que la probabilidad relativa de las transiciones cuadrupolares respecto de las dipolares de frecuencia similar (y de ahí, su intensidad relativa) es del orden del cuadrado del cociente de un radio atómico a la longitud de onda de la radiación emitida, cantidad que para radiación en la región visible del espectro es del orden de 10^{-6}.

XVII.16 Encuentre las reglas de selección para transiciones cuadrupolares eléctricas de: a) partículas confinadas en un pozo rectangular infinito unidimensional; b) partículas en un pozo de oscilador armónico unidimensional; c) un rotor rígido plano.

a) En el problema anterior vimos que la probabilidad de las transiciones cuadrupolares espontáneas por unidad de tiempo es proporcional al módulo cuadrado de los elementos de matriz $\langle n|\,\hat{Q}_{ij}\,|n'\rangle$. El tensor Q_{ij} tiene una sola componente en el caso unidimensional, proporcional a $\left\langle n' \mid (x-\overline{x})^2 \mid n\right\rangle$. Colocando el origen en un extremo del pozo de anchura a, se tiene $\bar{x} = a/2$, y queda, usando las funciones propias del pozo infinito (T3.31) y para $n \neq n'$,

$$\begin{aligned}
\left\langle n' \mid (x-\overline{x})^2 \mid n\right\rangle &= \frac{2}{a}\int_0^a \left(x-\frac{a}{2}\right)^2 \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n' x}{a}\right)\operatorname{sen}\left(\frac{\pi n x}{a}\right)dx \\
&= \frac{1}{a}\int_0^a \left(x^2 - ax + \frac{a^2}{4}\right)\left(\cos\frac{\pi\left(n'-n\right)x}{a}\right. \\
&\quad \left. - \cos\frac{\pi\left(n'+n\right)x}{a}\right)dx \\
&= \frac{a^2}{\pi^2\left(n'-n\right)^2}\left[\cos\pi\left(n'-n\right)+1\right] \\
&\quad -\frac{a^2}{\pi^2\left(n'+n\right)^2}\left[\cos\pi\left(n'+n\right)+1\right] \\
&= \frac{a^2}{\pi^2\left(n'-n\right)^2}\left[(-1)^{n'-n}+1\right] \\
&\quad -\frac{a^2}{\pi^2\left(n'+n\right)^2}\left[(-1)^{n'+n}+1\right],
\end{aligned}$$

es decir,

$$\left\langle n' \mid (x-\overline{x})^2 \mid n\right\rangle = \frac{a^2}{\pi^2}\left[(-1)^{n'+n}+1\right]\left[\frac{1}{\left(n'-n\right)^2} - \frac{1}{\left(n'+n\right)^2}\right]. \tag{XVII.244}$$

Este resultado muestra que la regla de selección de las transiciones cuadrupolares para el pozo infinito unidimensional coincide con la de las transiciones dipolares para este mismo sistema, es decir,

$$|\Delta n| = \left|n' - n\right| = \text{ un número par.} \tag{XVII.245}$$

Una consecuencia de esta coincidencia es que el espectro energético dipolar y el cuadrupolar coinciden, y sus líneas meramente se superponen. Es importante insistir en que estos resultados se refieren al caso unidimensional; para el pozo infinito esférico (como para cualquier problema en más de una dimensión) aparecen las reglas de selección generadas por el momento angular, que para transiciones cuadrupolares eléctricas son $\Delta l = 0, \pm 2$; $\Delta m = 0, \pm 1, \pm 2$ (esto último se demuestra en un caso particular en el inciso c) de este problema). Puesto que las transiciones dipolares eléctricas se dan para $\Delta l = \pm 1$, las transiciones dipolares y cuadrupolares nunca compiten en los problemas multidimensionales.

b) Para partículas confinadas en un pozo de oscilador armónico unidimensional centrado en el origen $\overline{x} = 0$, la probabilidad de las transiciones cuadrupolares es proporcional al elemento de matriz $\langle n' \mid x^2 \mid n \rangle$, con $|n\rangle$ las eigenfunciones de oscilador armónico. Del problema XI.14 (ecuación (XI.130), o del problema XIV.1, ecuación (XIV.9)) tenemos que

$$x^2 |n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\sqrt{n\,(n-1)}\,|n-2\rangle + (2n+1)\,|n\rangle + \sqrt{(n+1)\,(n+2)}\,|n+2\rangle \right], \tag{XVII.246}$$

de donde sigue que los elementos de matriz $\langle n' \mid x^2 \mid n \rangle$ difieren de cero sólo para $n' = n$ y $n' = n \pm 2$, lo que determina las reglas de selección para las transiciones cuadrupolares eléctricas en el presente caso. Cuando se trata de emisiones espontáneas, que ocurren sólo para $n' < n$, la regla de selección se reduce a $n' = n - 2$, que corresponde a emisión de energía de valor $2\hbar\omega$. Esto constituye el equivalente cuántico de radiación en segunda armónica.

c) La probabilidad de transición cuadrupolar eléctrica para un rotor rígido de radio R está determinada por los elementos de matriz $\langle m' \mid xy \mid m \rangle$, $\langle m' \mid x^2 \mid m \rangle$ y $\langle m' \mid y^2 \mid m \rangle$, calculados con las funciones propias

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Se tiene así que

$$\begin{aligned}
\langle m' \mid xy \mid m \rangle &= R^2 \langle m' \mid \operatorname{sen}\varphi \cos\varphi \mid m \rangle \\
&= \frac{R^2}{4\pi} \int_0^{2\pi} \operatorname{sen} 2\varphi\, e^{i(m-m')\varphi} d\varphi \\
&= \begin{cases} \pm iR^2/4, & m - m' = \pm 2 \\ 0, & m - m' \neq \pm 2 \end{cases} ; \qquad \text{(XVII.247)} \\
\langle m' \mid y^2 \mid m \rangle &= R^2 \langle m' \mid \operatorname{sen}^2\varphi \mid m \rangle = \frac{R^2}{4\pi} \int_0^{2\pi} (1 - \cos 2\varphi)\, e^{i(m-m')\varphi} d\varphi \\
&= \frac{R^2}{2}\delta_{mm'} - \frac{R^2}{4\pi} \begin{cases} 0, & |m - m'| \neq 2 \\ \pi, & |m - m'| = 2 \end{cases} ; \qquad \text{(XVII.248)} \\
\langle m' \mid x^2 \mid m \rangle &= R^2 \langle m' \mid \cos^2\varphi \mid m \rangle = R^2 \langle m' \mid m \rangle - R^2 \langle m' \mid \operatorname{sen}^2\varphi \mid m \rangle \\
&= \frac{R^2}{2}\delta_{mm'} + \frac{R^2}{4\pi} \begin{cases} 0, & m - m' \neq \pm 2 \\ \pi, & m - m' = \pm 2 \end{cases} . \qquad \text{(XVII.249)}
\end{aligned}$$

De estos resultados siguen las reglas de selección cuadrupolares $\Delta m = m' - m = 0, \pm 2$. A diferencia de los dos casos anteriores, para los cuales las reglas de selección tenían que ver sólo con la energía (el equivalente al número cuántico principal), las reglas de selección aquí son angulares.

XVII.2. Problemas adicionales

XVII.17 Estime la energía del estado base del átomo de hidrógeno usando como función de prueba la que describe el estado base de un oscilador armónico isotrópico de frecuencia apropiada. ¿Cuál es esta frecuencia?

Para simplificar la escritura se emplearán unidades atómicas, tomando $m = \hbar = e_0 = 1$. La función de prueba es una gaussiana, la que escribimos en la forma, ya normalizada,

$$\psi(r) = \left(\frac{\mu}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\mu r^2/2}, \quad \mu > 0. \tag{XVII.250}$$

El valor esperado del hamiltoniano calculado con esta función de prueba es

$$E(\mu) = \left\langle -\tfrac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{3\mu}{4} - 2\sqrt{\frac{\mu}{\pi}}, \tag{XVII.251}$$

expresión que toma su valor mínimo para

$$\mu = \frac{16}{9\pi}. \tag{XVII.252}$$

La energía mínima resulta

$$E_0^{\text{var}} = -\frac{4}{3\pi} = -0.424\ldots \text{ ua}, \tag{XVII.253}$$

mientras que el valor correcto es $E_0 = -0.5$ ua.

La energía cinética de un oscilador descrito por la función de onda (XVII.250) es $3\mu/4$, y por el teorema del virial es igual a $\frac{1}{4}m\omega^2 \langle r^2 \rangle = \frac{3}{8}\omega$ (pusimos $\langle r^2 \rangle = 3\hbar/2m\omega$). Con esta identificación la frecuencia óptima para el oscilador modelo es

$$\omega = 2\mu = \frac{32}{9\pi} \text{ ua}. \tag{XVII.254}$$

XVII.18 Determine con el método variacional la energía del estado base de un átomo de hidrógeno cuyo electrón es perturbado con el potencial $\eta\hbar^2/2m_0r^2, \eta > 0$.

El hamiltoniano, expresado en unidades atómicas, es

$$\hat{H} = \tfrac{1}{2}\hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{1}{r} + \frac{\eta}{2r^2}, \quad \eta > 0. \tag{XVII.255}$$

Debe escogerse con cuidado la función de prueba para que su comportamiento en el origen sea correcto. La función radial del estado base ($l = 0$) satisface la ecuación diferencial (cf. ecuación (T13.41))

$$-\tfrac{1}{2}\frac{d^2u}{dr^2} + \left(-\frac{1}{r} + \frac{\eta}{2r^2}\right)u = 0.$$

Muy cerca del origen esta ecuación se reduce a

$$-\tfrac{1}{2}\frac{d^2u}{dr^2}+\frac{\eta}{2r^2}u=0. \tag{XVII.256}$$

Proponiendo una solución de la forma $u\sim r^s$ resulta

$$s=\tfrac{1}{2}\left(1+\sqrt{1+4\eta}\right). \tag{XVII.257}$$

La otra solución de la ecuación cuadrática no se considera, pues para $\eta>0$ se obtiene una s negativa, que es físicamente inaceptable (para $-\frac{1}{4}<\eta<0$ habría que considerar ambas posibilidades). Por lo tanto, podemos proponer como función de prueba

$$u(r)=Ar^se^{-\lambda r}, \tag{XVII.258}$$

con lo que el valor esperado del hamiltoniano resulta

$$\left\langle\hat{H}\right\rangle=\frac{(s+2\eta)\,\lambda^2-2(2s-1)\lambda}{2s\,(2s-1)}. \tag{XVII.259}$$

Como función de λ esta expresión se minimiza para

$$\lambda_{\text{mín}}=\frac{2s-1}{s+2\eta}=\frac{2}{1+\sqrt{1+4\eta}}=\frac{1}{s}, \tag{XVII.260}$$

valor para el cual la energía resulta

$$E_0^{\text{var}}=\left\langle\hat{H}(\lambda_{\text{mín}})\right\rangle=\frac{\lambda_{\text{mín}}^2}{2}-\frac{\lambda_{\text{mín}}}{s}=-\frac{1}{2s^2}=-\frac{2}{\left(1+\sqrt{1+4\eta}\right)^2}. \tag{XVII.261}$$

Para $\eta=0$ la ecuación (XVII.257) da $s=1$ y de (XVII.260) sigue que $\lambda_{\text{mín}}=1$, con lo que la función de prueba se reduce a Are^{-r}, que es la solución exacta para el estado base; luego $E_0^{\text{var}}=-1/2$ coincide con la energía exacta del estado base en este caso. Para η pequeña (XVII.261) da

$$E_0^{\text{var}}=-\tfrac{1}{2}\,(1-\eta+\cdots)=E_0^{(0)}+\tfrac{1}{2}\eta. \tag{XVII.262}$$

XVII.19 Considere una partícula constreñida a moverse en la parte positiva del eje Ox, debido a la presencia de una barrera impenetrable en $x=0$. Sobre la partícula actúa el potencial

$$V(x)=\begin{cases} g^2x, & x>0;\\ \infty, & x=0.\end{cases}$$

Determine la energía y la función de onda del estado base con el método variacional usando la función de prueba (normalizada en $[0,\infty]$) $\psi_\beta(x)=2\beta^{3/2}xe^{-\beta x}$. Compare con la solución exacta del problema y comente sobre el procedimiento utilizado.

La función de onda propuesta

$$\psi_\beta(x)=2\beta^{3/2}xe^{-\beta x} \tag{XVII.263}$$

es simple (contiene sólo un parámetro), se anula en el origen, decrece exponencialmente para $x\to\infty$ y no posee nodos. El cálculo del valor esperado del hamiltoniano con el potencial lineal para $x>0$ es directo, y da

$$E(\beta)=\frac{\hbar^2\beta^2}{4m}+\frac{3g^2}{2\beta}, \tag{XVII.264}$$

expresión que tiene su mínimo como función de β para $\beta_0 = \left(3g^2m/2\hbar^2\right)^{1/3}$. De aquí sigue que la función de onda y la energía aproximadas, derivadas de esta función de prueba, son

$$\psi^{\text{var}}(x) = \psi_{\beta_0}(x) = 2\beta_0^{3/2} x e^{-\beta_0 x}, \quad \beta_0 = \left(\frac{3g^2m}{2\hbar^2}\right)^{1/3}; \qquad \text{(XVII.265)}$$

$$E^{\text{var}} = E(\beta_0) = \frac{3}{2\beta_0}\left(\frac{\hbar^2\beta_0^3}{3m} + g^2\right) = \frac{3^{5/3}}{2^{4/3}}\left(\frac{g^4\hbar^2}{2m}\right)^{1/3}. \qquad \text{(XVII.266)}$$

Construir las soluciones exactas es un tanto más laborioso. La ecuación de Schrödinger a resolver es

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(x) + g^2 x\psi(x) = E\psi(x), \quad x \geq 0, \qquad \text{(XVII.267)}$$

con $\psi(x) = 0$ para $x \leq 0$. La solución de esta ecuación se discute en la sección 10.4 del texto y en el problema X.18; en ambos lugares se muestra que la manera más simple de resolver esta ecuación consiste en pasar al espacio de momentos, en el que $\hat{p}^2$ es un número y $\hat{x} = i\hbar\partial/\partial p$; llamando $\varphi(p)$ a la función de onda en la representación p, la ecuación de Schrödinger en este espacio toma la forma

$$i\hbar g^2 \frac{\partial\varphi(p)}{\partial p} = \left(E - \frac{p^2}{2m}\right)\varphi(p), \qquad \text{(XVII.268)}$$

cuya solución es (cf. ecuación (T10.36) y X.99)

$$\varphi(p) = C_1 \exp i\frac{1}{\hbar g^2}\left(\frac{p^3}{6m} - Ep\right). \qquad \text{(XVII.269)}$$

Para regresar a la representación x debemos tomar la transformada de Fourier de $\varphi(p)$: $\psi(x) = \tilde{\varphi}_{[p]}(x)$, como sigue de la ecuación (T10.37), o (X.118). Esta transformada se expresa en términos de funciones de Airy, o bien, de funciones de Bessel de orden $1/3$. Como la función de onda debe decaer exponencialmente en el infinito, se hace necesario seleccionar la función de Airy $\text{Ai}(z)$, definida como[5]

$$\text{Ai}(z) = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{z}{3}}K_{1/3}(\tfrac{2}{3}z^{3/2}) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\left(\tfrac{1}{3}t^3 + zt\right)dt. \qquad \text{(XVII.270)}$$

De esta forma se obtiene para $x > 0$

$$\psi(x) = C\left(2g^2\hbar m\right)^{1/3}\text{Ai}\left[\left(\frac{2g^2m}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(x - \frac{E}{g^2}\right)\right]. \qquad \text{(XVII.271)}$$

Aún debemos imponer la condición de que esta función se anule en $x = 0$, lo que fija los eigenvalores de la energía como las soluciones de la ecuación

$$\text{Ai}\left[-\left(\frac{2m}{g^4\hbar^2}\right)^{1/3}E_n\right] = 0. \qquad \text{(XVII.272)}$$

Todos los ceros z_n de la función $\text{Ai}(z)$ se encuentran sobre el eje negativo real. Los primeros son

$$z_1 = -2.3381, \quad z_2 = -4.0879, \quad z_3 = -5.5205, \quad z_4 = -6.7867, \quad \cdots$$

[5] Abramowitz y Stegun (1965), sección 10.4.

Una expresión asintótica para los ceros de la función de Airy es

$$z_n \approx -\left[\frac{3\pi}{8}\,(4n-1)\right]^{2/3}. \tag{XVII.273}$$

Los valores propios de la energía resultan

$$E_n = \left(\frac{g^4\hbar^2}{2m}\right)^{1/3} |z_n|\,. \tag{XVII.274}$$

La función de onda del estado n para $x > 0$ es

$$\psi_n(x) = C_n \left(2g^2\hbar m\right)^{1/3} \mathrm{Ai}\left[\left(\frac{2g^2 m}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(x - \frac{E_n}{g^2}\right)\right]. \tag{XVII.275}$$

La comparación entre (XVII.266) y (XVII.274) da

$$\frac{E_1^{\mathrm{var}}}{E_1} = \frac{3^{5/3}}{2^{4/3}\,|z_1|} = 1.059\ldots,$$

es decir, un error del orden del 6 %. Es de notarse, sin embargo, la gran diferencia en el nivel de complejidad del cálculo y de la expresión para $\psi_1(x)$ entre ambas derivaciones.

XVII.20 El quarkonio es un mesón formado por un quark y su correspondiente antiquark, ligados en un estado s. Se conocen varias familias de ellos. En particular, la familia Υ está formada por quarks del tipo b, y sus energías (masas) son, en orden creciente y en MeV,

$$0.26, \quad 0.83, \quad 1.16, \quad 1.38, \quad \cdots$$

Se considera que el potencial de interacción entre los elementos del quarkonio puede representarse a pequeñas distancias como la combinación de un término proporcional a r^{-1} y un potencial de confinamiento, que se toma como lineal, de tal forma que puede escribirse

$$V(r) = -\frac{k_c}{r} + k^2 r.$$

En el caso del quark b, el término de confinamiento tiende a ser dominante, con excepción de los estados más bajos, para los cuales la perturbación coulombiana es significativa. Utilice los resultados del problema anterior para estimar las energías de los primeros estados Υ con el método variacional, considerando únicamente el potencial de confinamiento. La masa del quark b es aproximadamente 5 veces la masa del protón, es decir, $M_b c^2 = 4.6$ GeV.

Si se desprecia el término coulombiano y se toma en cuenta que $V(r) = \infty$ para $r < 0$, el problema coincide con el resuelto en el ejercicio anterior, y las energías requeridas están dadas directamente por la fórmula (XVII.274), con los cambios apropiados de los parámetros. Se obtiene, tomando en cuenta que la masa reducida del sistema es $M_b/2$,

$$E_n = \left(\frac{k^4\hbar^2}{M_b}\right)^{1/3} |z_n|\,. \tag{XVII.276}$$

El valor del parámetro k se puede fijar ya sea mediante un ajuste estadístico a partir de las masas experimentales (con el método de mínimos cuadrados, por ejemplo), o bien de otra fuente experimental. Se usa con frecuencia el valor $k = 400$ MeV/$\hbar c$. Con este valor insertado en (XVII.276) se obtienen las energías, en GeV,

$$0.42, \quad 0.73, \quad 0.98, \quad 1.20, \quad \cdots$$

La comparación con los valores experimentales muestra un acuerdo razonable, considerando la simplicidad extrema del modelo, excepción hecha del estado más bajo, para el cual la discrepancia es considerable.

El problema con el estado base se debe a la mayor importancia de la atracción coulombiana, pues en este caso la función de onda está muy concentrada en la región del origen. Un cálculo variacional detallado empleando la función de prueba (XVII.263) corrige considerablemente la situación, pues arroja $E_1 = 0.20$ GeV. La verificación de este resultado se deja como ejercicio para el lector.[6]

XVII.21 Un oscilador armónico unidimensional que en $t = -\infty$ se encuentra en su estado base, es excitado por un campo eléctrico uniforme y pulsante (colocándolo, por ejemplo, entre las placas de un condensador) dado por

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 e^{-(t/\tau)^2}.$$

Determine la probabilidad en el tiempo $t \to \infty$ de que el oscilador haya realizado una transición al estado excitado n.

La probabilidad (a primer orden) de que durante el tiempo que dura la perturbación (aquí, infinito) el oscilador realice una transición del estado base al estado n, está dada por la fórmula (T17.49) (con los cambios obvios)

$$\begin{aligned} w_{0n} &= \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} \langle n|\,\hat{H}'\,|0\rangle\, e^{i\omega_{n0}t}dt\right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} \langle n|\, e\mathcal{E}_0 e^{-(t/\tau)^2} x\,|0\rangle\, e^{i\omega_{n0}t}dt\right|^2 \\ &= \frac{e^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2}\,|\langle n|\,x\,|0\rangle|^2\left|\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{n0}t}e^{-(t/\tau)^2}dt\right|^2. \end{aligned} \qquad \text{(XVII.277)}$$

El elemento de matriz requerido se anula, salvo si $n = 1$, y vale

$$\langle n|\,x\,|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\delta_{n1}; \qquad \text{(XVII.278)}$$

la integral que aparece en (XVII.277) es inmediata; evaluándola se obtiene

$$w_{0n} = \frac{\pi e^2\mathcal{E}_0^2\tau^2}{2m\hbar\omega}e^{-\omega^2\tau^2/2}\delta_{n1}. \qquad \text{(XVII.279)}$$

El resultado muestra que (a primer orden de la teoría de perturbaciones) sólo se producen transiciones al primer estado excitado. Para fuerzas muy impulsivas ($\tau \to 0$, pero manteniendo constante el producto $\mathcal{E}_0\tau$), la probabilidad w_{01} está dada esencialmente por el coeficiente de la exponencial en la ecuación

[6] Mayores detalles pueden verse en F. J. Yndurain, *Mecánica cuántica* (Alianza Universidad, 1988), sección 17.4.

(XVII.279), mientras que para fuerzas que decrecen lentamente ($\tau \to \infty$) el factor exponencial puede reducir drásticamente la probabilidad de transición, fenómeno que hemos encontrado en repetidas ocasiones como típico de las perturbaciones adiabáticas.

XVII.22 Un átomo de hidrógeno en su estado base es excitado por la aplicación en $t = 0$ de un campo eléctrico uniforme y pulsante, dado por

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 e^{-t/\tau}, \quad t \geq 0.$$

El campo está orientado sobre el eje Oz. Determine la probabilidad de transición al estado $|nlm\rangle$, a primer orden de la teoría de perturbaciones.

A primer orden, la probabilidad de transición está dada por la fórmula (T17.49), que corresponde a la (XVII.277); como en el presente caso $\hat{H}' = e\mathcal{E}_0 z e^{-t/\tau}$, aplicándola se obtiene

$$\begin{aligned} w(100 \to nlm) &= \frac{e^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty \langle 100| z |nlm\rangle e^{-t/\tau} e^{i\omega_{n1}t} dt \right|^2 \\ &= \frac{e^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} |\langle 100| z |nlm\rangle|^2 \left| \int_0^\infty e^{i\omega_{n1}t} e^{-t/\tau} dt \right|^2 . \end{aligned} \quad \text{(XVII.280)}$$

Poniendo $z = r\cos\theta$ es posible verificar que los únicos elementos de matriz que no se anulan corresponden a $l = 1$, $m = 0$, por lo que resulta

$$w(100 \to nlm) = \delta_{l1}\delta_{m0} \frac{e^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} |\langle 100| z |n10\rangle|^2 \left| \int_0^\infty e^{i\omega_{n1}t} e^{-t/\tau} dt \right|^2 . \quad \text{(XVII.281)}$$

Para el átomo de hidrógeno se tiene

$$\langle 100| z |n10\rangle = \frac{16}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{1}{n(n-1)(n+1)}} \left(\frac{n}{n+1}\right)^4 \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^{n-2} a_0. \quad \text{(XVII.282)}$$

La integral temporal es elemental y se puede escribir de inmediato la probabilidad solicitada:

$$w(100 \to nlm) = \frac{2^8}{3} \frac{a_0\mathcal{E}_0^2\tau^2}{m_0} n^7 \frac{(n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}} \frac{\delta_{l1}\delta_{m0}}{1 + \left(\frac{\alpha c\tau}{2a_0}\right)^2 \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)^2}. \quad \text{(XVII.283)}$$

Para pulsos suficientemente largos se puede despreciar la unidad del denominador del último factor, y la expresión anterior se hace independiente de τ:

$$w(100 \to nlm) = \delta_{l1}\delta_{m0} \frac{2^{14}}{3} \left(\frac{\hbar^2}{m_0 e^2}\right)^4 \frac{\mathcal{E}_0^2}{e^2} n^{11} \frac{(n-1)^{2n-7}}{(n+1)^{2n+7}}. \quad \text{(XVII.284)}$$

Es claro de esta expresión que $\mathcal{E}_0$ tiene que valer muchas unidades atómicas para que la probabilidad de transición resulte significativa.

XVII.23 El núcleo de un átomo en reposo que se encuentra en su estado base recibe un impulso que le imprime la velocidad $\mathbf{v}$. Determine:

a) la probabilidad de que el átomo se excite a un estado n;

b) la probabilidad total de que el átomo se excite o se ionice.

Considere que el impulso aplicado es muy breve y tiene una duración pequeña comparada con los períodos atómicos y con la cantidad a/v, donde a es del orden del radio atómico.

Es conveniente describir el átomo después del impacto en un sistema de coordenadas K' que se mueve con velocidad $\mathbf{v}$ respecto del sistema de referencia inicial K. La brevedad del impacto (en particular, respecto a a/v) permite suponer que durante la acción del impulso el núcleo permanece estacionario, de tal manera que las posiciones de los electrones al momento en que cesa son esencialmente las mismas en ambos sistemas de coordenadas. Debido a esto podemos escribir la función de onda electrónica inicial (es decir, al cesar el impulso) en el sistema K' en la forma

$$\psi_0' = \psi'(t=0) = \psi_0 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \quad \mathbf{k} = m\mathbf{v}/\hbar, \quad \mathbf{R} = \sum_i \mathbf{r}_i, \tag{XVII.285}$$

donde la suma se extiende sobre todos los Z electrones y ψ_0 es la función de onda electrónica del estado base del átomo en reposo.

a) Con la ecuación (T17.52), la probabilidad de transición al estado excitado n queda dada por

$$w_{0n} = \left| \int \psi_n^* \psi_0 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} dr_1 \cdots dr_Z \right|^2. \tag{XVII.286}$$

Cuando resulta legítimo desarrollar el exponencial y conservar sólo términos hasta primer orden (como ocurre, en particular, para $ka \ll 1$) el resultado anterior se puede aproximar como

$$w_{0n} = \left| \int \psi_n^* (1 - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}) \psi_0 dr_1 \cdots dr_Z \right|^2,$$

es decir,

$$w_{0n} = \left| \int \psi_n^* (\mathbf{k}\cdot\textstyle\sum_i \mathbf{r}_i) \psi_0 dr_1 \cdots dr_Z \right|^2. \tag{XVII.287}$$

b) La probabilidad total de excitación o ionización es igual a la probabilidad de que el átomo deje el estado base. Si w_{00} denota a la probabilidad de que el átomo permanezca en su estado base, se tiene que

$$w_T = w_{\text{exc+ion}} = 1 - w_{00} = 1 - \left| \int \psi_0^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_0 dr_1 \cdots dr_Z \right|^2. \tag{XVII.288}$$

Para el caso particular de un átomo de hidrógeno, la última expresión se reduce a

$$\begin{aligned} w_T &= 1 - \left| \int \psi_0^2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3r \right|^2 \\ &= 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{4}k^2a_0^2\right)^4}. \end{aligned} \tag{XVII.289}$$

Este resultado muestra que para $ka_0 \gg 1$ (lo que ocurre para un impulso muy intenso), la probabilidad de que el átomo permanezca en su estado base es sumamente baja, $w_{00} = (2/ka_0)^8$, mientras que es prácticamente igual a uno si el impulso es débil, $w_{00} = 1 - k^2a_0^2$.

* **XVII.24** Considere el hamiltoniano

$$\hat{H}(t) = -\beta B_0 \hat{S}_3 - \beta B_1 \left[\hat{S}_1 \cos\omega t + \hat{S}_2 \operatorname{sen}\omega t\right],$$

donde β es una constante. Este puede ser, por ejemplo, parte del hamiltoniano de un sistema constituido por una partícula con espín $\hat{\mathbf{S}}$ inmersa en dos campos magnéticos, uno constante de intensidad B_0 paralelo al eje Oz, y otro perpendicular al primero y que gira alrededor del eje Oz con frecuencia angular ω. En este caso sería $\beta = \mu_0/\hbar$. Determine el operador de evolución que corresponde a este hamiltoniano y calcule para el caso $S = 1/2$ la probabilidad de transición para el tiempo t del estado inicial $|+\rangle$ a un estado final dado por $|-\rangle$.

El estado del sistema para el tiempo t, expresado en términos del estado inicial a $t = 0$ y del operador de evolución $\hat{U}(t)$, es (cf. ecuación (T9.40))

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,|\psi(0)\rangle\,, \tag{XVII.290}$$

donde $\hat{U}(t)$ es solución de la ecuación

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}, \quad \hat{U}(0) = 1. \tag{XVII.291}$$

En el caso presente hemos de considerar el hamiltoniano dependiente del tiempo

$$\hat{H}(t) = -\beta B_0 \hat{S}_3 - \beta B_1 \left(\hat{S}_1 \cos\omega t + \hat{S}_2 \operatorname{sen}\omega t\right). \tag{XVII.292}$$

Buscaremos una solución de la ecuación (XVII.291) con hamiltoniano (XVII.292) de la forma

$$\hat{U} = e^{-i\omega\hat{S}_3 t/\hbar} e^{-i\hat{R}t/\hbar}, \tag{XVII.293}$$

donde $\hat{R}$ representa algún operador apropiado, independiente de t. De aquí sigue que

$$U = \left(-i\omega\hat{S}_3/\hbar\right)\hat{U} + e^{-i\omega\hat{S}_3 t/\hbar}\left(-i\hat{R}/\hbar\right)e^{-i\hat{R}t/\hbar}, \tag{XVII.294}$$

expresión que sustituida en la ecuación de Schrödinger da

$$\left(\omega\hat{S}_3 + e^{-i\omega\hat{S}_3 t/\hbar}\hat{R}e^{i\omega\hat{S}_3 t/\hbar}\right)\hat{U} = \left[-\beta B_0\hat{S}_3 - \beta B_1\left(\hat{S}_1\cos\omega t + \hat{S}_2\operatorname{sen}\omega t\right)\right]\hat{U}. \tag{XVII.295}$$

Para que esta ecuación se pueda satisfacer escribimos $\hat{R}$ como la suma de dos términos,

$$\hat{R} = \hat{R}_1(\hat{S}_1, \hat{S}_2) + \hat{R}_3(\hat{S}_3), \tag{XVII.296}$$

que dependen sólo de los operadores indicados. Sustituyendo y tomando en cuenta que $\hat{R}_3$ conmuta con los operadores exponenciales, pues contienen sólo el operador $\hat{S}_3$, se obtiene

$$\begin{aligned}\left(\omega\hat{S}_3 + \hat{R}_3 + e^{-i\omega\hat{S}_3 t/\hbar}\hat{R}_1 e^{i\omega\hat{S}_3 t/\hbar}\right)\hat{U} \\ = \left[-\beta B_0\hat{S}_3 - \beta B_1\left(\hat{S}_1\cos\omega t + \hat{S}_2\operatorname{sen}\omega t\right)\right]\hat{U}.\end{aligned} \tag{XVII.297}$$

Esta ecuación se satisface poniendo

$$\omega\hat{S}_3 + \hat{R}_3 = -\beta B_0\hat{S}_3, \tag{XVII.298}$$

$$e^{-i\omega\hat{S}_3 t/\hbar}\hat{R}_1 e^{i\omega\hat{S}_3 t/\hbar} = -\beta B_1\left(\hat{S}_1\cos\omega t + \hat{S}_2\operatorname{sen}\omega t\right). \tag{XVII.299}$$

De (XVII.298) sigue que

$$\hat{R}_3 = (-\omega - \beta B_0)\,\hat{S}_3 = (\omega_0 - \omega)\,\hat{S}_3, \tag{XVII.300}$$

donde se puso

$$\omega_0 = -\beta B_0. \tag{XVII.301}$$

La constante ω_0 representa en general una frecuencia característica del sistema, establecida por el campo externo B_0; cuando se trata efectivamente de campos magnéticos, coincide con la frecuencia de Larmor. De manera similar definimos una segunda frecuencia, asociada ésta al campo B_1, $\omega_1 = -\beta B_1$; con su ayuda reescribimos la ecuación (XVII.299) en la forma

$$\hat{R}_1 = \omega_1 e^{i\omega\hat{S}_3 t/\hbar}\left(\hat{S}_1\cos\omega t + \hat{S}_2\,\mathrm{sen}\,\omega t\right)e^{-i\omega\hat{S}_3 t/\hbar}. \tag{XVII.302}$$

Como los operadores exponenciales son operadores de rotación, se obtiene, utilizando la expresión (T9.73) del texto, que

$$e^{i\omega\hat{S}_3 t/\hbar}\hat{S}_1\,e^{-i\omega\hat{S}_3 t/\hbar} = \hat{S}_1\cos\omega t + \hat{S}_2\,\mathrm{sen}\,\omega t, \tag{XVII.303}$$

$$e^{i\omega\hat{S}_3 t/\hbar}\hat{S}_2\,e^{-i\omega\hat{S}_3 t/\hbar} = \hat{S}_1\,\mathrm{sen}\,\omega t - \hat{S}_2\cos\omega t. \tag{XVII.304}$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} &e^{i\omega\hat{S}_3 t/\hbar}\left(\hat{S}_1\cos\omega t + \hat{S}_2\,\mathrm{sen}\,\omega t\right)e^{-i\omega\hat{S}_3 t/\hbar} \\ &\quad= \left(\hat{S}_1\cos\omega t + \hat{S}_2\,\mathrm{sen}\,\omega t\right)\cos\omega t + \left(\hat{S}_1\,\mathrm{sen}\,\omega t - \hat{S}_2\cos\omega t\right)\mathrm{sen}\,\omega t \\ &\quad= \hat{S}_1. \end{aligned} \tag{XVII.305}$$

Con esto la ecuación (XVII.302) se reduce a

$$\hat{R}_1 = \omega_1\hat{S}_1. \tag{XVII.306}$$

Por lo tanto, el operador de evolución solicitado es

$$\hat{U} = e^{-i\omega\hat{S}_3 t/\hbar}\,e^{-i\left[\omega_1\hat{S}_1 + (\omega_0-\omega)\hat{S}_3\right]t/\hbar}. \tag{XVII.307}$$

Para el caso de espín $1/2$ el hamiltoniano (XVII.292) se puede reescribir en la forma

$$\hat{H}(t) = -\beta\frac{\hbar}{2}B_0\hat{\sigma}_3 - \beta\frac{\hbar}{2}B_1\left(\hat{\sigma}_1\cos\omega t + \hat{\sigma}_2\,\mathrm{sen}\,\omega t\right). \tag{XVII.308}$$

Una interpretación alternativa de este hamiltoniano es que representa un sistema de dos niveles (un átomo, por ejemplo, cuyo espacio de Hilbert haya sido truncado a sólo dos dimensiones) con energías propias no perturbadas de valor $\pm\frac{\hbar}{2}\beta B_0$, sujeto a una perturbación periódica de intensidad definida por B_1.[7] La probabilidad de transición entre el estado inicial $|+\rangle$ y el estado $|-\rangle$ al tiempo t es

$$w_{+-}(t) = |\langle - \,|\Psi(t)\rangle|^2 = \left|\langle -|\,\hat{U}(t)\,|+\rangle\right|^2, \tag{XVII.309}$$

[7] El modelo de dos niveles se estudia con detalle en el problema XV.17. El tema se amplía en el problema XVII.29.

es decir,

$$\begin{aligned} w_{+-}(t) &= \left|\langle -|\, e^{-i\omega \hat{S}_3 t/\hbar} e^{-i\left[\omega_1 \hat{S}_1 + (\omega_0-\omega)\hat{S}_3\right]t/\hbar}\, |+\rangle\right|^2 \\ &= \left|\langle -|\, e^{-i\omega \hat{\sigma}_3 t/2} e^{-i[\omega_1 \hat{\sigma}_1 + (\omega_0-\omega)\hat{\sigma}_3]t/2}\, |+\rangle\right|^2 \\ &= \left|\langle -|\, e^{-i[\omega_1 \hat{\sigma}_1 + (\omega_0-\omega)\hat{\sigma}_3]t/2}\, |+\rangle\right|^2 . \end{aligned} \tag{XVII.310}$$

En el último paso se tomó en cuenta que

$$\langle -|\, e^{-i\omega\hat{\sigma}_3 t/2} = e^{i\omega t/2}\, \langle -|\,, \tag{XVII.311}$$

y que el módulo de la función exponencial resultante es uno. Para seguir adelante con el desarrollo es conveniente definir un vector $\mathbf{\Omega}$ con componentes $\Omega_1 = \omega_1$, $\Omega_2 = 0$, $\Omega_3 = \omega_0 - \omega$, con dirección $\hat{\mathbf{n}}_\Omega = \mathbf{\Omega}/\left|\mathbf{\Omega}\right|$ y magnitud $\Omega \equiv \left|\mathbf{\Omega}\right| = \sqrt{\omega_1^2 + (\omega_0-\omega)^2}$. En términos de este vector podemos escribir

$$\begin{aligned} w_{+-}(t) &= \left|\langle -|\, e^{-i\Omega \hat{\mathbf{n}}_\Omega \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} t/2}\, |+\rangle\right|^2 \\ &= \left|\langle -|\cos\tfrac{1}{2}\Omega t - i\hat{\mathbf{n}}_\Omega \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \operatorname{sen}\tfrac{1}{2}\Omega t\, |+\rangle\right|^2 . \end{aligned} \tag{XVII.312}$$

Como

$$\begin{aligned} &\langle -|\cos\tfrac{1}{2}\Omega t - i\hat{\mathbf{n}}_\Omega \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \operatorname{sen}\tfrac{1}{2}\Omega t\, |+\rangle \\ &\qquad = -i\, \langle -|\, \hat{\mathbf{n}}_\Omega \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \operatorname{sen}\tfrac{1}{2}\Omega t\, |+\rangle \\ &\qquad = -i \sum_i n_i\, \langle -|\, \hat{\sigma}_i \operatorname{sen}\tfrac{1}{2}\Omega t\, |+\rangle \\ &\qquad = -i \left(\frac{\omega_1}{\Omega}\, \langle -|\, \hat{\sigma}_1\, |+\rangle + \frac{\omega_0-\omega}{\Omega}\, \langle -|\, \hat{\sigma}_3\, |+\rangle \right) \operatorname{sen}\tfrac{1}{2}\Omega t \\ &\qquad = -i\frac{\omega_1}{\Omega}\, \langle -|\, \hat{\sigma}_1\, |+\rangle \operatorname{sen}\tfrac{1}{2}\Omega t = -i\frac{\omega_1}{\Omega} \operatorname{sen}\tfrac{1}{2}\Omega t, \end{aligned} \tag{XVII.313}$$

la probabilidad de transición requerida resulta finalmente

$$w_{+-}(t) = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \operatorname{sen}^2 \tfrac{1}{2}\Omega t = \frac{\omega_1^2}{2\Omega^2}\left(1 - \cos\Omega t\right). \tag{XVII.314}$$

* **XVII.25** Utilice la descripción de interacción (que se discute en el problema ilustrativo 9.4 del texto) para desarrollar un método perturbativo.

Por razones de completez se resolverá el problema desde su inicio. Considere el problema de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}_0\psi, \tag{XVII.315}$$

con $\hat{H}_0$ un hamiltoniano que no depende explícitamente del tiempo. La solución puede escribirse en la forma

$$\psi(t) = \hat{U}(t,0)\psi(0), \quad \hat{U}(t,t_0) = e^{-i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar}, \tag{XVII.316}$$

donde el operador de evolución es solución de la ecuación

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,t_0)}{\partial t} = \hat{H}_0\hat{U}(t,t_0). \tag{XVII.317}$$

Como el operador $\hat{U}(t,t_0)$ es unitario (véase la sección 9.5 del texto), la aplicación de su inversa a $\psi_n(t)$ conduce al estado inicial:

$$\hat{U}^\dagger(t,0)\psi(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\psi(t) = \psi(0). \tag{XVII.318}$$

La función de onda $\psi(t)$ (que obviamente evoluciona con el tiempo) corresponde a la descripción de Schrödinger, mientras que $\psi(0)$, que se obtiene de la anterior mediante una transformación unitaria (y es independiente del tiempo), corresponde a la descripción de Heisenberg del mismo estado; de aquí sigue que podemos escribir

$$\psi(t) \equiv \psi_S(t), \quad \psi(0) \equiv \psi_H(t): \quad \psi_H = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\psi_S(t). \tag{XVII.319}$$

En el tiempo $t = 0$ ambas descripciones coinciden: $\psi_H = \psi_S(0)$. Como la transformación unitaria actúa también sobre los operadores, un operador (independiente del tiempo) $\hat{F} \equiv \hat{F}_S$ dado en la descripción de Schrödinger se transforma en la de Heisenberg en $\hat{F}_H(t)$, dado por la ecuación (T9.55), o sea

$$\hat{F}_H(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{F}e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \tag{XVII.320}$$

De esta manera, su derivada temporal satisface la ecuación de Heisenberg

$$i\hbar\frac{d\hat{F}_H}{dt} = i\hbar\frac{\partial\hat{F}_H}{\partial t} + \left[\hat{F}_H, \hat{H}_0\right]. \tag{XVII.321}$$

Con este procedimento, la evolución temporal de las funciones de onda se ha transferido a los operadores. Dos conclusiones importantes siguen de inmediato de (XVII.320): por un lado, para $t = 0$, $\hat{F}_H(0) = \hat{F} = \hat{F}_S$, es decir, también los operadores coinciden en ambas descripciones para $t = 0$. La segunda es que para $\hat{F} = \hat{H}_0$ se tiene $\hat{H}_{0H} = \hat{H}_{0S}$, es decir, en ambas descripciones el hamiltoniano es el mismo.

La transición de la descripción de Schrödinger a la de Heisenberg se puede describir gráficamente, pensando que, colocados en el espacio de Hilbert del sistema, nos movemos de tal forma que seguimos la evolución de la función de onda; con ello, esta función permanece constante (e igual a $\psi(0) = \psi_H$), pero el resto del sistema, y, en particular, sus variables dinámicas, los vemos evolucionar. Una analogía clásica elemental es la siguiente: Considere a los caballitos de un carrusel de feria como el equivalente de las funciones de onda del sistema; en la descripción de Schrödinger vemos el carrusel desde la feria, de tal manera que cada caballito da vueltas continuamente, pero el resto del mundo permanece fijo. Para pasar a la descripción de Heisenberg, nos subimos al carrusel, con lo que cada caballito permanece fijo, pero la feria gira a su alrededor. Es claro que este tipo de posibilidades no se circunscriben a la teoría cuántica; de hecho, la teoría clásica de la ecuación de Liouville, por ejemplo, se desarrolla tanto en la descripción de Schrödinger como en la de Heisenberg.

Consideremos ahora el caso en que se agrega un potencial de perturbación, de tal manera que el problema a resolver es (ponemos por simplicidad $\Psi \equiv \Psi_S$)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{H}'\right)\Psi. \tag{XVII.322}$$

Como antes, se supone que $\hat{H}_0$ no depende del tiempo, pero la perturbación puede depender arbitrariamente de él. En la descripción de interacción, la función de

onda se toma en la descripción de Heisenberg respecto del hamiltoniano $\hat{H}_0$ y se escribe (cf. ecuación (1) del problema ilustrativo 9.4 del texto):

$$\Psi_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\Psi(t). \tag{XVII.323}$$

De la ecuación (XVII.318) sigue que si $\hat{H}' = 0$, $\Psi_I(t) = \Psi(0)$ y la función de onda resulta constante. Esto significa que toda la evolución que puede experimentar $\Psi_I(t)$ se debe a la perturbación. En efecto, derivando (XVII.323) y usando (XVII.322) sigue que

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\Psi_I}{\partial t} &= -\hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\Psi(t) + i\hbar e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \\ &= -\hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\Psi(t) + e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}\left(\hat{H}_0 + \hat{H}'\right)\Psi = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{H}'\Psi \\ &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{H}' e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\Psi = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{H}' e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}\Psi_I(t) = \hat{H}'_I\Psi_I(t), \end{aligned} \tag{XVII.324}$$

o sea,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_I}{\partial t} = \hat{H}'_I\Psi_I(t), \tag{XVII.325}$$

donde $\hat{H}'_I$ es el hamiltoniano de perturbación en la descripción de interacción (cf. ecuación (XVII.320)),

$$\hat{H}'_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{H}' e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \tag{XVII.326}$$

Tal como sucede para $\hat{H}'$, en esta descripción todos los operadores (exceptuando $\hat{H}_0$, naturalmente) evolucionan siguiendo la ley (XVII.320). Pero mientras que la evolución de los operadores es realizada por $\hat{H}_0$, la del vector de estado se debe enteramente a $\hat{H}'$. Además, para $t = 0$, $\hat{H}'_I(0) = \hat{H}'_S = \hat{H}'_H(0)$.

La ecuación (XVII.325) puede ser integrada formalmente como se hizo antes, para obtener

$$\Psi_I(t) = \hat{U}(t, t_0)\Psi_I(t_0), \tag{XVII.327}$$

$$i\hbar\frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} = \hat{H}'_I(t)\hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{I}, \tag{XVII.328}$$

donde el *nuevo* operador de evolución cambia debido sólo a la perturbación (el anterior evolucionaba debido a $\hat{H}_0$). A esta ecuación puede dársele con facilidad la forma de una ecuación integral,

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}'_I(t')\hat{U}(t', t_0)dt'. \tag{XVII.329}$$

Esta expresión integral se presta a un desarrollo por iteraciones sucesivas que permite hacer un análisis perturbativo del problema cuando el hamiltoniano de perturbación es "pequeño", de tal manera que $\hat{U}(t, t_0)$ no se aleje demasiado de su valor inicial $\mathbb{I}$. Si éste es el caso, podemos escribir sucesivamente

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) &= \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}'_I(t')\hat{U}(t', t_0)dt' \\ &= \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\hat{H}'_I(t')\left[\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}'_I(t'')\hat{U}(t'', t_0)\right] \end{aligned}$$

$$= \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}'_I(t')\left\{\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t'} dt''\hat{H}'_I(t'') \times\left[\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t''} dt'''\hat{H}'_I(t''')\hat{U}(t''',t_0)\right]\right\}. \quad \text{(XVII.330)}$$

Continuando de esta manera se obtiene el desarrollo

$$\hat{U}(t,t_0) = \mathbb{I} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}'_I(t') + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}'_I(t')\int_{t_0}^{t'} dt''\hat{H}'_I(t'') + \cdots \quad \text{(XVII.331)}$$

El término de orden n contiene n integrales y n factores H'_I, de tal manera que es posible escribir

$$\hat{U}(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty}\hat{U}^{(n)}(t,t_0), \quad \hat{U}^{(0)}(t,t_0) = \mathbb{I}, \quad \text{(XVII.332)}$$

$$\hat{U}^{(1)}(t,t_0) = \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}'_I(t')dt', \quad \text{(XVII.333)}$$

$$\hat{U}^{(2)}(t,t_0) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}\hat{H}'_I(t')dt'\int_{t_0}^{t'}\hat{H}'_I(t'')dt'', \quad \text{(XVII.334)}$$

etc. Es posible (y muy conveniente) reescribir la última expresión en la siguiente forma, que se obtiene haciendo un cambio en el orden de integración (para facilitar la transformación se utiliza como auxiliar la función escalón de Heaviside $\Theta(t)$):

$$\begin{aligned}
\int_{t_0}^{t}\hat{H}'_I(t')dt'\int_{t_0}^{t'}\hat{H}'_I(t'')dt'' &= \int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t}dt''\Theta(t'-t'')\hat{H}'_I(t')\hat{H}'_I(t'') \\
&= \int_{t_0}^{t}dt''\int_{t_0}^{t}dt'\Theta(t'-t'')\hat{H}'_I(t')\hat{H}'_I(t'') \\
&= \int_{t_0}^{t}dt''\int_{t''}^{t}dt'\hat{H}'_I(t')\hat{H}'_I(t'') \\
&= \int_{t_0}^{t}dt'\int_{t'}^{t}dt''\hat{H}'_I(t'')\hat{H}'_I(t') \text{ (intercambiando } t', t'') \\
&= \tfrac{1}{2}\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}'_I(t')\hat{H}'_I(t'') \\
&\quad + \tfrac{1}{2}\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t'}^{t}dt''\hat{H}'_I(t'')\hat{H}'_I(t') \\
&= \hat{\mathsf{T}}\tfrac{1}{2}\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t}dt''\hat{H}'_I(t')\hat{H}'_I(t''). \quad \text{(XVII.335)}
\end{aligned}$$

En la antepenúltima igualdad simplemente se tomó la mitad de cada una de las dos expresiones iguales y se sumaron. Para escribir el último resultado se introdujo el *operador cronológico* $\hat{\mathsf{T}}$ que ordena los factores a su derecha en orden decreciente del tiempo; por ejemplo

$$\hat{\mathsf{T}}\hat{H}'_I(t')\hat{H}'_I(t'') = \begin{cases} \hat{H}'_I(t')\hat{H}'_I(t''), & \text{si } t' \geq t'', \\ \hat{H}'_I(t'')\hat{H}'_I(t'), & \text{si } t'' \geq t'. \end{cases} \quad \text{(XVII.336)}$$

Al reordenar los factores temporalmente, se les debe tratar como si fueran cantidades que conmutan. Es posible mostrar que una reducción similar puede realizarse con cada término del desarrollo (XVII.331); la integral múltiple de orden n da n términos, que por la acción del operador cronológico se reducen a uno solo con todas las integraciones extendidas desde t_0 hasta t, y precedido por el factor $1/n!$, exactamente como ocurrió arriba con el caso $n = 2$. De esta manera se obtiene

$$\hat{U}^{(n)}(t,t_0) = \frac{1}{n!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \hat{\mathsf{T}} \int_{t_0}^{t} \hat{H}'_I(t_1)dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t} \hat{H}'_I(t_n)dt_n. \qquad \text{(XVII.337)}$$

Sumando estos términos se obtiene como forma sintética de (XVII.331)

$$\hat{U}(t,t_0) = \hat{\mathsf{T}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \hat{H}'_I(t')dt'\right). \qquad \text{(XVII.338)}$$

Como caso simple a analizar, considérese que el estado inicial es un estado propio de $\hat{H}_0$, ψ_n, digamos; la amplitud de transición a otro eigenestado de $\hat{H}_0$, ψ_k, es

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{nk}(t) \equiv \langle\psi_k|\,\Psi_{In}(t)\rangle &= \langle\psi_k|\,U(t,t_0)\,|\psi_n\rangle \\
&= \langle\psi_k|\,\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}'_I(t')dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}\hat{H}'_I(t')dt' \\
&\quad \times \int_{t_0}^{t'}\hat{H}'_I(t'')dt'' + \cdots |\psi_n\rangle \\
&= \delta_{nk} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\langle\psi_k|\,\hat{H}'_I(t')\,|\psi_n\rangle\,dt' + \cdots \\
&\quad + \frac{1}{2}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \hat{\mathsf{T}}\int_{t_0}^{t}dt' \\
&\quad \times \int_{t_0}^{t}dt''\,\langle\psi_k|\,\hat{H}'_I(t')\hat{H}'_I(t'')\,|\psi_n\rangle + \cdots
\end{aligned} \qquad \text{(XVII.339)}$$

Con la ayuda de (XVII.326) podemos escribir, por ejemplo, para la amplitud de transición a primer orden

$$\mathcal{A}^{(1)}_{nk}(t) = \langle\psi_k|\,U^{(1)}(t,t_0)\,|\psi_n\rangle = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\langle\psi_k|\,\hat{H}'\,|\psi_n\rangle\,e^{i\omega_{kn}t'}dt'. \qquad \text{(XVII.340)}$$

Por lo tanto, la probabilidad de transición para $t \to \infty$ y a primer orden de la teoría de perturbaciones es

$$w^{(1)}_{nk} = \left|\mathcal{A}^{(1)}_{nk}\right|^2 = \left|\langle\psi_k|\,U^{(1)}(t,t_0)\,|\psi_n\rangle\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{t_0}^{\infty}\langle\psi_k|\,\hat{H}'\,|\psi_n\rangle\,e^{i\omega_{kn}t}dt\right|^2, \qquad \text{(XVII.341)}$$

que es precisamente la fórmula derivada de la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo, ecuación (XVII.277) (o (T17.49) en el texto).

Un análisis de la ecuación (XVII.338) permite entender el origen del operador cronológico. Derivándola respecto del tiempo se obtiene

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}(t,t_0) = i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\mathsf{T}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}'_I(t')dt'\right)$$

$$= \hat{\mathsf{T}}\hat{H}'_I(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}'_I(t')dt'\right)$$
$$= \hat{H}'_I(t)\hat{\mathsf{T}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}'_I(t')dt'\right) = \hat{H}'_I(t)\hat{U}(t,t_0), \quad \text{(XVII.342)}$$

y se cumple correctamente la ecuación (XVII.328). Sin la presencia del operador cronológico no hubiera quedado definida una posición precisa para el factor $\hat{H}'_I(t)$ que proviene de la derivada del exponente. El operador $\hat{\mathsf{T}}$ "empuja" este factor hasta la extrema derecha (por ser su argumento la máxima t) y conduce con ello a la ecuación diferencial correcta. Tomado esto en cuenta, la serie de igualdades en (XVII.342) equivale a una derivación rápida de (XVII.338).

Una de las ventajas que ofrece este método para desarrollar la teoría de perturbaciones es que es directamente generalizable al caso relativista, por lo que es de uso muy extendido en la teoría cuántica de campos.

XVII.26 Considere una variable dinámica $\hat{\xi}$ que es integral de movimiento de un sistema regido por un hamiltoniano $\hat{H}_0$. ¿Qué le sucede a esta variable cuando se aplica la perturbación $\hat{H}'(t)$?

Por ser $\hat{\xi}$ una integral de movimiento del sistema no perturbado, conmuta con $\hat{H}_0$. Sin embargo, en general debe esperarse que el conmutador $[\hat{\xi}, \hat{H}']$ sea diferente de cero y $\hat{\xi}$ deje de ser integral de movimiento al aplicar la perturbación, por lo que evolucionará con mayor o menor lentitud, dependiendo de la importancia relativa de $\hat{H}_0$ y $\hat{H}'$. Su evolución está determinada por la ecuación de Heisenberg (como se usa la descripción de Heisenberg sólo respecto del hamiltoniano no perturbado, se está manejando efectivamente la descripción de interacción discutida en el problema anterior):

$$i\hbar\frac{d\hat{\xi}}{dt} = \left[\hat{\xi}, \hat{H}_0 + \hat{H}'_I(t)\right] = \left[\hat{\xi}, \hat{H}'_I(t)\right]. \quad \text{(XVII.343)}$$

Integrando se obtiene

$$\hat{\xi}(t) = \hat{\xi}(0) + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \left[\hat{\xi}(t'), \hat{H}'_I(t')\right] dt', \quad \text{(XVII.344)}$$

donde $\hat{\xi}(0) \equiv \xi$ representa el eigenvalor inicial (no perturbado) de $\hat{\xi}$. Para obtener una serie perturbativa basta iterar esta expresión, lo que da

$$\hat{\xi}(t) = \xi + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \left[\hat{\xi}(t'), \hat{H}'_I(t')\right]$$
$$= \xi + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \left[\xi + \frac{1}{i\hbar}\int_0^{t'} dt'' \left[\hat{\xi}(t''), \hat{H}'_I(t'')\right], \hat{H}'_I(t')\right]. \quad \text{(XVII.345)}$$

Continuando con este procedimiento se llega finalmente al desarrollo

$$\hat{\xi}(t) = \xi + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \left[\xi, \hat{H}'_I(t')\right] + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \left[\left[\xi, \hat{H}'_I(t'')\right], \hat{H}'_I(t')\right] + \cdots \quad \text{(XVII.346)}$$

Vamos a estudiar con mayor detalle la corrección a primer orden, dada por

$$\hat{\xi}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \left[\xi, \hat{H}'_I(t')\right]. \quad \text{(XVII.347)}$$

Suponemos que el sistema se encuentra inicialmente en el estado propio n de $\hat{H}_0$, y escribimos $\xi = \xi_n$. El elemento de matriz de esta $\hat{\xi}^{(1)}(t)$ entre el estado inicial y otro eigenestado k cualquiera es

$$\begin{aligned}\langle k|\,\hat{\xi}^{(1)}(t)\,|n\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\,\langle k|\left[\xi,\hat{H}'_I(t')\right]|n\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\,\langle k|\,\xi\hat{H}'_I(t') - \hat{H}'_I(t')\xi\,|n\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\,(\xi_k-\xi_n)\int_0^t dt'\,\langle k|\,\hat{H}'_I(t')\,|n\rangle\,,\end{aligned}$$

es decir,

$$\langle k|\,\hat{\xi}^{(1)}(t)\,|n\rangle = (\xi_k-\xi_n)\,\mathcal{A}^{(1)}_{nk}(t), \tag{XVII.348}$$

donde

$$\mathcal{A}^{(1)}_{nk}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\,\langle k|\,\hat{H}'_I(t')\,|n\rangle \tag{XVII.349}$$

es la amplitud de transición a primer orden, y al tiempo t del estado propio n al estado propio k de $\hat{H}_0$, inducida por la perturbación (tal como fue determinada antes, ecuación (XVII.340)). De aquí resulta que

$$\left|\langle k|\,\hat{\xi}^{(1)}(t)\,|n\rangle\right|^2 = (\xi_k-\xi_n)^2 w^{(1)}_{nk}(t), \quad w^{(1)}_{nk}(t) = \left|\mathcal{A}^{(1)}_{nk}(t)\right|^2, \tag{XVII.350}$$

con $w^{(1)}_{nk}(t)$ la probabilidad de transición a primer orden, y al tiempo t del estado propio n al estado propio k de $\hat{H}_0$, inducida por la perturbación. Estos resultados se aplican, por ejemplo, al estudio de la evolución de $\hat{H}_0$ inducida por $\hat{H}'$, en el caso en que estos hamiltonianos no conmuten.

XVII.27 Considere un átomo con Z electrones, pero con sólo dos niveles de interés, denotados como 1 (el estado inferior o "base") y 2 (el estado excitado), e inmerso en un campo de radiación de frecuencia ω cercana a la frecuencia de transición ω_{21}. Suponga que el estado inicial es el 1 y determine con un cálculo directo la probabilidad de transición de este estado inicial al estado excitado en la aproximación dipolar, suponiendo que la densidad espectral del campo que ilumina al átomo es de banda ancha. Utilice el resultado anterior para determinar la vida media del estado excitado.

La función de onda perturbada de un átomo de dos niveles puede escribirse como sigue, usando la forma general dada por la ecuación (T17.41):

$$\psi = C_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}\varphi_1(x) + C_2(t)e^{-iE_2t/\hbar}\varphi_2(x). \tag{XVII.351}$$

El sistema de ecuaciones (T17.42) que determina los coeficientes $C_i(t)$ en presencia de la perturbación se reduce a

$$i\hbar\dot{C}_1 = C_1H'_{11} + C_2e^{-i\omega_{21}t}H'_{12}, \tag{XVII.352}$$

$$i\hbar\dot{C}_2 = C_2H'_{22} + C_1e^{i\omega_{21}t}H'_{21}. \tag{XVII.353}$$

En lo sucesivo escribiremos $(E_2-E_1)/\hbar = \omega_{21} \equiv \omega_0$. El momento dipolar eléctrico instantáneo del átomo puede escribirse en la forma

$$\mathbf{D} = -e\sum_{i=1}^{Z}\mathbf{r}_i = -e\mathbf{R}, \quad \mathbf{R} = \sum_{i=1}^{Z}\mathbf{r}_i. \tag{XVII.354}$$

En la aproximación dipolar y despreciando los efectos magnéticos, el hamiltoniano de interacción del átomo con un campo eléctrico oscilatorio de frecuencia ω se puede escribir en la forma

$$\hat{H}' = -\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}_0 \cos \omega t. \tag{XVII.355}$$

Este hamiltoniano es impar, $H'(-\mathbf{r}_i) = -H'(\mathbf{r}_i)$, en donde la reflexión se hace respecto del núcleo atómico; en consecuencia, los elementos de matriz H'_{11} y H'_{22} son ambos nulos (suponiendo que, como es usual, φ_1 y φ_2 tienen paridad definida). Con $H'_{21} = H'^*_{12}$, el sistema de ecuaciones para las funciones C_i se reduce así a

$$i\dot{C}_1 = \mathcal{V} e^{-i\omega_0 t} \cos(\omega t) C_2, \tag{XVII.356}$$

$$i\dot{C}_2 = \mathcal{V}^* e^{i\omega_0 t} \cos(\omega t) C_1, \tag{XVII.357}$$

donde se ha escrito

$$\mathcal{V} = -\frac{1}{\hbar} \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{D}_{12} = -\frac{1}{\hbar} \mathbf{E}_0 \cdot \langle \varphi_1 | \, \mathbf{D} \, | \varphi_2 \rangle \, . \tag{XVII.358}$$

Consideraremos que el campo eléctrico está dirigido sobre el eje Oz, por lo que podemos escribir

$$\mathcal{V} = -\frac{1}{\hbar} \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{D}_{12} = \frac{e}{\hbar} E_0 \langle \varphi_1 | \, Z \, | \varphi_2 \rangle \, . \tag{XVII.359}$$

Al escribir estas ecuaciones no ha sido considerada la emisión espontánea de radiación. Esto se puede corregir agregando un término apropiado que represente el efecto de la emisión espontánea sobre la amplitud del nivel superior. En otras palabras, la ecuación (XVII.357) debe sustituirse por

$$i\dot{C}_2 = \mathcal{V}^* e^{i\omega_0 t} \cos(\omega t) \, C_1 - i\gamma C_2, \tag{XVII.360}$$

donde $\gamma = A_{21}/2$, con A_{21} el coeficiente A de Einstein entre los estados 2 y 1; sin embargo, no haremos aquí esta modificación.

Tal como se indica en el enunciado, para el estudio de las transiciones estimuladas por el campo externo es conveniente suponer que el átomo se encuentra inicialmente en el estado base, de tal manera que las condiciones iniciales son

$$C_1(0) = 1, \quad C_2(0) = 0. \tag{XVII.361}$$

Del sistema de ecuaciones para los coeficientes sigue que C_2 es solución de la ecuación diferencial

$$\frac{d^2 C_2}{dt^2} + (\omega \tan \omega t - i\omega_0) \frac{dC_2}{dt} + |\mathcal{V}|^2 \cos^2(\omega t) \, C_2 = 0. \tag{XVII.362}$$

Esta ecuación es demasiado complicada para que sea práctico intentar resolverla de manera exacta en el caso general (véanse los ejercicios XVII.44 y XVII.45). Sin embargo, la solución a primer orden es inmediata, pues (XVII.361) sustituido en las ecuaciones (XVII.356)-(XVII.357) da a primer orden en el potencial de perturbación

$$\dot{C}_1 = 0, \quad \dot{C}_2 = -i\mathcal{V}^* e^{i\omega_0 t} \cos \omega t, \tag{XVII.363}$$

con solución

$$C_1 = 1, \quad C_2 = \frac{\mathcal{V}^*}{2} \left[\frac{1 - e^{i(\omega_0 + \omega)t}}{\omega_0 + \omega} + \frac{1 - e^{i(\omega_0 - \omega)t}}{\omega_0 - \omega} \right]. \tag{XVII.364}$$

Las transiciones estimuladas ocurren a frecuencias ω del campo externo muy próximas a la frecuencia de transición ω_0, por lo que el segundo término en el paréntesis (con denominador pequeño) es mucho mayor que el primero (con denominador grande); este último, además, oscila a frecuencias considerablemente mayores que el segundo término; por todo esto, el primer término se puede despreciar sin cometer un error grave. Esta es la llamada *aproximación de onda rotatoria*. Si se emplea esta aproximación se obtiene

$$\begin{aligned} C_2 &= \frac{\mathcal{V}^*}{2}\frac{1-e^{i(\omega_0-\omega)t}}{\omega_0-\omega} = \frac{\mathcal{V}^*}{2}\frac{e^{-i(\omega_0-\omega)t/2}-e^{i(\omega_0-\omega)t/2}}{\omega_0-\omega}e^{i(\omega_0-\omega)t/2} \\ &= -i\mathcal{V}^*\frac{\operatorname{sen}(\omega_0-\omega)t/2}{\omega_0-\omega}e^{i(\omega_0-\omega)t/2}. \end{aligned} \tag{XVII.365}$$

De esta expresión obtenemos para la probabilidad de transición del estado base al estado excitado una expresión enteramente similar a la ecuación (T17.55) del texto,

$$w_{1\to 2} = |C_2(t)|^2 = |\mathcal{V}|^2\,\frac{\operatorname{sen}^2(\omega_0-\omega)t/2}{(\omega_0-\omega)^2}. \tag{XVII.366}$$

Para obtener de aquí el coeficiente B_{12} de Einstein podríamos aplicar directamente los procedimientos discutidos en el texto; sin embargo, aprovecharemos la simplicidad del problema para hacer un análisis más inmediato e intuitivo y, por lo mismo, de mayor valor didáctico.

La frecuencia ω_0 de los átomos del ensamble considerado no es exactamente la misma para cada uno de ellos, pues aunque en principio está dada por la fórmula de Bohr $\omega_0 = (E_2 - E_1)/\hbar$, diversos efectos, como la anchura natural de las líneas (debida a la vida media finita de los niveles excitados), el efecto Doppler asociado al movimiento térmico de los átomos, etc., contribuyen a que exista más bien una distribución (normalmente muy angosta) de frecuencias de transición alrededor de ω_0. Si denotamos con $\Delta\omega$ este ancho y por $\rho(\omega)$ la densidad espectral del campo de radiación que ilumina al átomo, el resultado que arroja el experimento no es dado por (XVII.366), sino por su promedio, es decir, por la expresión

$$w_{1\to 2} = \frac{4\pi e^2}{3\hbar^2}\,|Z_{12}|^2 \int_{\omega_0-\frac{1}{2}\Delta\omega}^{\omega_0+\frac{1}{2}\Delta\omega} \rho(\omega)\frac{\operatorname{sen}^2\left(\omega_0-\omega\right)t/2}{\left(\omega_0-\omega\right)^2}d\omega. \tag{XVII.367}$$

Para escribir esta ecuación se usó (XVII.359) y se hizo la sustitución $E_z^2 = \frac{1}{3}\mathbf{E}_0^2 \to (4\pi/3)\int\rho(\omega)d\omega$. Para un campo de radiación de banda muy ancha la densidad espectral $\rho(\omega)$ puede tomarse como constante para todas las frecuencias de interés, por lo que se le puede extraer del signo de integración sin cometer un error importante. Con esta aproximación, esencial para la teoría de los coeficientes B de Einstein, en (XVII.367) aparece la integral

$$\int_{\omega_0-\frac{1}{2}\Delta\omega}^{\omega_0+\frac{1}{2}\Delta\omega} \frac{\operatorname{sen}^2\left(\omega_0-\omega\right)t/2}{\left(\omega_0-\omega\right)^2}d\omega = \int_{-\frac{1}{2}\Delta\omega}^{\frac{1}{2}\Delta\omega} \frac{\operatorname{sen}^2\omega t/2}{\omega^2}d\omega \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sen}^2\omega t/2}{\omega^2}d\omega = \pi t. \tag{XVII.368}$$

La aproximación que se ha hecho para evaluar la integral es legítima sólo para $t\to\infty$, pues sólo en este caso los límites de integración se pueden extender hasta el infinito, debido a lo angosto del máximo. Con esto la ecuación (XVII.367) da

$$w_{1\to 2} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2}\,|Z_{12}|^2\,\rho(\omega)t. \tag{XVII.369}$$

En la teoría de Einstein la probabilidad de transición estimulada calculada en el intervalo t se escribe en la forma (cf. ecuación (T9.79))

$$w_{1\to 2} = B_{12}\rho(\omega)t, \tag{XVII.370}$$

por lo que, comparando, se obtiene para el coeficiente B_{12} de Einstein:

$$B_{12} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2}\left|Z_{12}\right|^2 = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2}\left|\langle\varphi_1|\,\mathbf{R}\,|\varphi_2\rangle\right|^2. \tag{XVII.371}$$

El resultado anterior nos permite determinar la vida media del nivel excitado de la siguiente manera: Como se discute en la sección 9.7 del texto, los coeficientes A, B de Einstein satisfacen las relaciones generales

$$B_{nm} = B_{mn}, \tag{XVII.372}$$

$$A_{nm} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}B_{nm}. \tag{XVII.373}$$

Aplicando estas expresiones al caso presente, se obtiene de (XVII.371) para la probabilidad de transición espontánea desde el estado excitado al inferior:

$$A_{21} = \frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}\left|Z_{12}\right|^2 = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}\left|\langle\varphi_1|\,\mathbf{D}\,|\varphi_2\rangle\right|^2. \tag{XVII.374}$$

Este resultado es precisamente la ecuación (T9.98) del texto, la cual pudo haberse obtenido directamente de esa fórmula. La vida media del estado φ_2 es simplemente $\tau_2 = A_{21}^{-1}$. Ésta es la vida media debida, por ejemplo, al fenómeno de fluorescencia (emisión retardada de radiación absorbida).[8]

XVII.28 Considere un sistema formado por dos fermiones acoplados oscilando sobre ejes ortogonales, descrito por el hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2\right) + \tfrac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2) + \tfrac{1}{2}m\Omega^2(x-y)^2.$$

Determine la función de onda del sistema con el método Hartree-Fock.

El problema tiene solución exacta, la que puede obtenerse fácilmente pasando a las variables de centro de masa $\frac{1}{2}(x+y)$ y relativa $x-y$. En el estado base el espín total es cero y debe tomarse para la función orbital la solución radial simétrica; resulta (véase ejercicio XVII.46)

$$\Psi(x,y) = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\gamma^{1/4}\exp\left[-\frac{\alpha^2}{4}(1+\gamma)(x^2+y^2) - \frac{\alpha^2}{2}(1-\gamma)xy\right], \tag{XVII.375}$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},\ \kappa = \frac{\Omega^2}{\omega^2},\ \gamma = \sqrt{1+2\kappa}. \tag{XVII.376}$$

Para aplicar el método Hartree-Fock tomamos como función de onda orbital

$$\Psi^{\mathrm{HF}}(x,y) = \psi(x)\psi(y), \tag{XVII.377}$$

con $\psi(x)$, $\psi(y)$ soluciones ambas de la ecuación (T17.32), es decir,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x) + \tfrac{1}{2}m\Omega^2\int(x-y)^2\left|\psi(y)\right|^2\psi(x)dy = E\psi(x). \tag{XVII.378}$$

[8] Mayores detalles pueden verse en Loudon (1983), capítulo 2.

Simplificando, queda

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \tfrac{1}{2}m\,(1+\kappa)\,\omega^2 x^2\psi(x) = \left[E - \tfrac{1}{2}m\kappa\omega^2\int y^2\,|\psi(y)|^2\,dy\right]\psi(x). \tag{XVII.379}$$

La solución que nos interesa de esta ecuación de Schrödinger para un oscilador es la que corresponde a su estado base; esto nos da de inmediato la solución Hartree-Fock:

$$\Psi^{\mathrm{HF}}(x,y) = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\,(1+\kappa)^{1/4}\exp\left[-\frac{\alpha^2}{2}\,(1+\kappa)^{1/2}\left(x^2+y^2\right)\right]. \tag{XVII.380}$$

Una manera simple de comparar esta solución con la exacta consiste en considerar el caso $\kappa \ll 1$ (que equivale a tomar la perturbación como pequeña). Desarrollando ambas soluciones en serie de κ se encuentra que

$$\Psi(x,y) = \Psi^{\mathrm{HF}}(x,y)\exp\left(-\tfrac{1}{2}\alpha^2\kappa xy\right), \tag{XVII.381}$$

lo que muestra que las dos funciones tienen un comportamiento similar para un rango amplio de valores de κ, x, y. De hecho, un análisis más detallado permite verificar que $\Psi^{\mathrm{HF}}(x,y)$ es una buena aproximación a la solución exacta, incluso para valores relativamente grandes de κ, para los cuales una solución perturbativa sería impensable.[9]

* **XVII.29** En el problema XV.22 se describe un procedimiento general para tratar problemas cuánticos en un espacio de Hilbert de dos dimensiones. Desarrolle en detalle un modelo similar de átomo de dos niveles acoplado a un campo de radiación descrito en segunda cuantización. Utilice la aproximación dipolar y desprecie los efectos cuadráticos del campo.

El hamiltoniano de un sistema compuesto por un electrón atómico en interacción con un campo de radiación clásico (es decir, no cuantizado) en la norma de Coulomb (para la cual se cumple que $\nabla\cdot\mathbf{A} = 0$) se puede escribir en la forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + e\phi + H_r, \tag{XVII.382}$$

o bien, desarrollando,

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V(r) + H_r - \frac{e}{m_0 c}\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2m_0c^2}\mathbf{A}^2, \tag{XVII.383}$$

donde H_r representa el hamiltoniano del campo de radiación transversal y $V(r) = e\phi$ es el potencial coulombiano sobre el electrón (es decir, la energía debida al campo longitudinal); se han dejado de lado los términos (divergentes) de autointeracción y no se ha considerado ningún movimiento nuclear.[10] Escribimos

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mathrm{at}} + H_r + \hat{H}_{\mathrm{int}}, \tag{XVII.384}$$

$$\hat{H}_{\mathrm{at}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V(r), \tag{XVII.385}$$

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = -\frac{e}{m_0 c}\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2m_0c^2}\mathbf{A}^2. \tag{XVII.386}$$

[9] Mayores detalles pueden verse en W. P. Latham y D. H. Kobe, *Am. J. Phys.* **41** (1973) 1258.

[10] Discusiones detalladas pueden verse en Cohen-Tannoudji, Dupont-Roc y Grynberg (1989) y Milonni (1994).

$\hat{H}_{\rm at}$ representa el hamiltoniano que describe el electrón atómico, mientras que $\hat{H}_{\rm int}$ es el hamiltoniano que describe la interacción átomo-campo en la norma de Coulomb. En lo sucesivo se va a despreciar el último término $\sim \mathbf{A}^2$, considerando que sus efectos son de segundo orden, por lo que se escribirá simplemente

$$\hat{H}_{\rm int} = -\frac{e}{m_0 c}\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}. \tag{XVII.387}$$

Para los propósitos que siguen es conveniente hacer un desarrollo de Fourier del campo de radiación y escribir el potencial vectorial en la forma (se hace el desarrollo considerando el campo en un volumen finito V, arbitrariamente grande)

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} C_{\mathbf{k}\lambda}\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}\left[a_{\mathbf{k}\lambda}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega_k t} + a^*_{\mathbf{k}\lambda}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+i\omega_k t}\right]. \tag{XVII.388}$$

El vector $\mathbf{k}$ describe el momento del modo y λ su polarización, con $k = |\mathbf{k}| = \omega_k/c$ (pues debe cumplirse que $E^2 = k^2c^2$); la condición $\nabla\cdot\mathbf{A} = 0$ se transforma en la condición de transversalidad

$$\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} = 0. \tag{XVII.389}$$

Como las componentes de Fourier son mutuamente ortogonales se cumple que

$$\int_V \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{A}^*_{\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r},t)d^3r = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}. \tag{XVII.390}$$

La factorización de las amplitudes de Fourier del campo en la forma $C_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}\lambda}$ es convencional y se hace con el propósito de simplificar la transición al caso cuántico. Los factores se pueden seleccionar para que el hamiltoniano del campo quede expresado, tomando en cuenta (XVII.390), en la forma

$$H_r = \sum_{\mathbf{k}\lambda}\mathcal{E}_{\mathbf{k}\lambda}a^*_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}\lambda}, \tag{XVII.391}$$

donde $\mathcal{E}_{\mathbf{k}\lambda}$ es la energía del modo correspondiente; el factor $a^*_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}\lambda}$ puede así tomarse como el "peso" del modo (por ejemplo, = 1 si está presente, = 0 en caso contrario), o bien tomarse cada uno como la unidad, si se desea. Para el caso en que el campo clásico es estocástico o aleatorio, las amplitudes $a_{\mathbf{k}\lambda}$ se pueden seleccionar como variables estocásticas que portan la información estadística del campo. De manera similar, serán estas amplitudes las que permitirán introducir las propiedades cuánticas del campo en forma "natural" (aunque enteramente formal).

El campo de radiación dado por la ecuación (XVII.388) puede verse como un desarrollo en términos de sus osciladores elementales de frecuencia ω_k, que pueden explicitarse asociando el factor temporal a la correspondiente amplitud, es decir, en términos de las amplitudes periódicas

$$a_{\mathbf{k}\lambda}(t) = a_{\mathbf{k}\lambda}e^{-i\omega_k t}, \quad a^*_{\mathbf{k}\lambda}(t) = a^*_{\mathbf{k}\lambda}e^{+i\omega_k t}. \tag{XVII.392}$$

Éstos son precisamente los osciladores que se cuantizan para pasar formalmente de la representación de un campo clásico a uno cuántico: basta para ello que las amplitudes de los osciladores elementales (XVII.392) se "cuanticen", es decir, que en vez de números se les tome como operadores, con la correpondencia $a_{\mathbf{k}\lambda} \to \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$, $a^*_{\mathbf{k}\lambda} \to \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}$ y las reglas de cuantización propias de los osciladores armónicos, es decir,

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t), \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}, \tag{XVII.393}$$

con todos los conmutadores $[\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t), \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)]$, $[\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}(t), \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)]$ nulos. Estas reglas son la generalización directa de las reglas de cuantización (T11.49) de los osciladores discutidas en la sección 11.4 del texto, a lo que se agrega la hipótesis de que los osciladores son mutuamente independientes a tiempos iguales. En esta forma, los coeficientes $C_{\mathbf{k}\lambda}$ deben elegirse para que la ecuación (XVII.391) se transforme en la correspondiente fórmula cuántica, es decir,

$$\hat{H}_r = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \tfrac{1}{2} \right). \tag{XVII.394}$$

Puesto que el término $\frac{1}{2}\hbar\omega$ se genera automáticamente como producto de las reglas de conmutación (XVII.393), basta fijar el valor de $C_{\mathbf{k}\lambda}$, tal que $\mathcal{E}_{\mathbf{k}\lambda}$ se reduzca a $\hbar\omega_k$. Esto se consigue poniendo

$$C_{\mathbf{k}\lambda} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}}. \tag{XVII.395}$$

El campo de radiación descrito en esta forma corresponde al campo de vacío de la electrodinámica cuántica (cuando se trata del estado fundamental) y sus excitaciones cuánticas, y queda expresado en términos de *operadores de campo* como $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)$, $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t)$, $\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t)$, etc. Las propias ecuaciones de Maxwell se transforman así en ecuaciones entre operadores. Debe ser claro que ésta es una transición mayor, llena de un profundo significado físico, no menor en ningún caso al que ocurre al pasar de las ecuaciones de movimiento de Newton a las correspondientes ecuaciones de Heisenberg. En particular, el cambio significa dotar al campo de propiedades cuánticas similares a las adquiridas por los osciladores materiales al ser cuantizados. La justificación final de un paso tan trascendente proviene de los resultados que arroja la teoría así elaborada, y no puede reducirse (al menos, no debiera reducirse) a la mera analogía matemática.

Aceptando el esquema anterior, las ecuaciones clásicas escritas arriba siguen siendo válidas, con la sustitución de las variables de campo por los correspondientes operadores. Se obtiene con este procedimiento

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{at}} + \hat{H}_r + \hat{H}_{\text{int}}, \tag{XVII.396}$$

$$\hat{H}_{\text{at}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \hat{V}(r), \tag{XVII.397}$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{e}{m_0 c} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2m_0 c^2} \hat{\mathbf{A}}^2. \tag{XVII.398}$$

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega_k t} + \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\omega_k t} \right). \tag{XVII.399}$$

En la aproximación lineal el hamiltoniano de interacción resulta

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{e}{m_0 c} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = -\frac{e}{m_0 c} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} \right) \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}. \tag{XVII.400}$$

Nótese con cuidado que los operadores $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$ y $\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}$ operan en el espacio de Hilbert definido por los osciladores del campo, mientras que operadores de la partícula como $\hat{\mathbf{p}}$, etc., operan en su correspondiente espacio de Hilbert, de tal manera

que el espacio de Hilbert del sistema completo es el producto de ambos subespacios. De manera similar, las componentes del vector de estado del sistema se escribirán como productos de dos vectores, uno en cada uno de los subespacios. Con este material preparatorio se puede pasar al estudio del modelo de átomo de dos niveles.

Consideremos el conjunto de estados propios del átomo, y sea $|i\rangle$ uno de ellos; usándolos como base e introduciendo por comodidad los operadores elementales

$$\hat{\sigma}_{ij} = |i\rangle \langle j| , \tag{XVII.401}$$

el hamiltoniano atómico se reescribe en la forma

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{at}} &= \sum_i \sum_j |i\rangle \langle i| \hat{H}_{\text{at}} |j\rangle \langle j| = \sum_{i,j} |i\rangle \langle j| \langle i| \hat{H}_{\text{at}} |j\rangle = \sum_{i,j} |i\rangle \langle j| E_j \delta_{ij} \\ &= \sum_i E_i |i\rangle \langle i| = \sum_i E_i \hat{\sigma}_{ii}. \end{aligned} \tag{XVII.402}$$

A su vez, el operador de momento se puede reescribir en la forma

$$\hat{\mathbf{p}} = \sum_i \sum_j |i\rangle \langle i| \hat{\mathbf{p}} |j\rangle \langle j| = \sum_{i,j} \mathbf{p}_{ij} |i\rangle \langle j| \equiv \sum_{i,j} \mathbf{p}_{ij} \hat{\sigma}_{ij}. \tag{XVII.403}$$

Con esto el hamiltoniano total se transforma en

$$\hat{H} = \sum_i E_i \hat{\sigma}_{ii} + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \tfrac{1}{2} \right) - \hbar \sum_{i,j} \sum_{\mathbf{k}\lambda} C_{\mathbf{k}\lambda ij} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} \right) \hat{\sigma}_{ij}, \tag{XVII.404}$$

en donde se introdujeron los nuevos coeficientes

$$C_{\mathbf{k}\lambda ij} = \frac{e}{m_0} \sqrt{\frac{2\pi}{V\hbar\omega_k}} \mathbf{p}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} = ie \sqrt{\frac{2\pi}{V\hbar\omega_k}} \omega_{ij} \mathbf{x}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}. \tag{XVII.405}$$

La última igualdad sigue directamente de las ecuaciones de movimiento de Heisenberg, que dan $p_{ij} = im_0\omega_{ij}x_{ij}$ (ecuación (T9.96)). Puesto que se está desarrollando la teoría a primer orden, la presente aproximación es suficiente.

Hasta aquí el átomo puede poseer cualquier número de estados. Consideraremos ahora el caso en que el espacio de Hilbert del átomo puede reducirse (artificiosa o naturalmente) a dos dimensiones, de tal manera que hay sólo dos estados, que denotaremos como $|1\rangle = |-\rangle , |2\rangle = |+\rangle$; escribiremos asimismo $\omega_{21} = \omega_0 = (E_2 - E_1)/\hbar$, con $E_2 > E_1$. Puesto que hay sólo dos dimensiones, se cumple que $\hat{\sigma}_{11} + \hat{\sigma}_{22} = |+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| = \mathbb{I}$, y resulta

$$\begin{aligned} \sum_i E_i \hat{\sigma}_{ii} &= E_1 \hat{\sigma}_{11} + E_2 \hat{\sigma}_{22} \\ &= \tfrac{1}{2} E_1 (\mathbb{I} + \hat{\sigma}_{11} - \hat{\sigma}_{22}) + \tfrac{1}{2} E_2 (\mathbb{I} + \hat{\sigma}_{22} - \hat{\sigma}_{11}) \\ &= \tfrac{1}{2} (E_1 + E_2) + \tfrac{1}{2} (E_2 - E_1) (\hat{\sigma}_{22} - \hat{\sigma}_{11}) , \end{aligned} \tag{XVII.406}$$

es decir,

$$\sum_i E_i \hat{\sigma}_{ii} = E_0 \hat{\sigma}_0 + \tfrac{1}{2} \hbar\omega_0 \hat{\sigma}_3, \tag{XVII.407}$$

donde E_0 representa la energía promedio de los dos estados, $\hat{\sigma}_0 \equiv \mathbb{I}$ es la matriz unidad 2×2 y $\hat{\sigma}_3$ es una matriz de Pauli (cf. secciones 8.4 y 12.5 del texto),

$$\hat{\sigma}_3 = \hat{\sigma}_{22} - \hat{\sigma}_{11} = |+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -| . \tag{XVII.408}$$

Este operador puede interpretarse como la diferencia de las poblaciones entre los estados superior e inferior, ya que $\langle\hat{\sigma}_3\rangle = P_2 - P_1$.

Suponiendo que, como sucede normalmente, $\mathbf{x}_{11} = \mathbf{x}_{22} = 0$, $\mathbf{x}_{12} = \mathbf{x}_{21}$ (que implica $\mathbf{p}_{12} = -\mathbf{p}_{21}$), se obtiene en forma análoga

$$\begin{aligned}\sum_{i,j} C_{\mathbf{k}\lambda ij}\hat{\sigma}_{ij} &= C_{\mathbf{k}\lambda 12}\hat{\sigma}_{12} + C_{\mathbf{k}\lambda 21}\hat{\sigma}_{21} = -C_{\mathbf{k}\lambda 21}\left(\hat{\sigma}_{12} - \hat{\sigma}_{21}\right)\\ &= -C_{\mathbf{k}\lambda}\hat{\sigma}_2, \end{aligned} \tag{XVII.409}$$

donde se introdujeron los coeficientes

$$C_{\mathbf{k}\lambda} = -iC_{\mathbf{k}\lambda 21} = e\omega_0\sqrt{\frac{2\pi}{V\hbar\omega_k}}\mathbf{x}_{12}\cdot\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \tag{XVII.410}$$

y la matriz de Pauli

$$\hat{\sigma}_2 = i\left(\hat{\sigma}_{12} - \hat{\sigma}_{21}\right) = i\left(|-\rangle\langle+| - |+\rangle\langle-|\right). \tag{XVII.411}$$

De esta manera el hamiltoniano queda expresado en la forma (compárese con la ecuación (XV.131))

$$\hat{H} = E_0\hat{\sigma}_0 + \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0\hat{\sigma}_3 + \sum_{\mathbf{k}\lambda}\hbar\omega_k\left(\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \tfrac{1}{2}\right) + \hbar\sum_{\mathbf{k}\lambda} C_{\mathbf{k}\lambda}\left(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\right)\hat{\sigma}_2. \tag{XVII.412}$$

Como para la mayoría de los estudios convencionales las constantes aditivas E_0 y $1/2\sum_{\mathbf{k}\lambda}\hbar\omega_k$ (¡esta última infinita!) no juegan un papel dinámico, se acostumbra redefinir el hamiltoniano, sustrayéndole estas cantidades. Queda de esta manera[11]

$$\hat{H} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0\hat{\sigma}_3 + \sum_{\mathbf{k}\lambda}\hbar\omega_k\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + i\hbar\sum_{\mathbf{k}\lambda} C_{\mathbf{k}\lambda}\left(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\right)\left(\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^\dagger\right). \tag{XVII.413}$$

Se han introducido aquí los operadores

$$\hat{\sigma} \equiv \hat{\sigma}_{12} = |-\rangle\langle+|, \quad \hat{\sigma}^\dagger \equiv \hat{\sigma}_{21} = |+\rangle\langle-|, \tag{XVII.414}$$

que juegan el papel de operadores atómicos de ascenso y descenso, como puede verse de su acción sobre los estados atómicos $|+\rangle$ y $|-\rangle$:

$$\hat{\sigma}|-\rangle = |-\rangle\langle+|-\rangle = 0, \quad \hat{\sigma}|+\rangle = |-\rangle\langle+|+\rangle = |-\rangle; \tag{XVII.415}$$

$$\hat{\sigma}^\dagger|-\rangle = |+\rangle\langle-|-\rangle = |+\rangle, \quad \hat{\sigma}^\dagger|+\rangle = |+\rangle\langle-|+\rangle = 0. \tag{XVII.416}$$

Sus propiedades de conmutación son

$$[\hat{\sigma}, \hat{\sigma}^\dagger] = -\hat{\sigma}_3; \quad [\hat{\sigma}, \hat{\sigma}_3] = 2\hat{\sigma}. \tag{XVII.417}$$

Más en general, se cumple que

$$[\hat{\sigma}_{ij}, \hat{\sigma}_{kl}] = [|i\rangle\langle j|, |k\rangle\langle l|] = \delta_{jk}\hat{\sigma}_{il} - \delta_{il}\hat{\sigma}_{kj}. \tag{XVII.418}$$

[11] Es usual hacer esta simplificación; ésta es la razón por la que arriba no se distingue entre el hamiltoniano completo y el truncado. Sin embargo, debe siempre tenerse presente que se han omitido todos los términos asociados a la energía del punto cero, los que pueden llegar a jugar un papel físico.

Los conmutadores *a tiempos iguales* de operadores de campo y de partícula actúan sobre espacios diferentes (o sobre sistemas independientes) y se anulan:

$$[\hat{\sigma}_{ij}(t), \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t)] = 0, \quad \text{etc.} \tag{XVII.419}$$

Sin embargo, esto ya no es cierto para tiempos diferentes, debido a la interacción entre las partes del sistema, y las correspondientes relaciones de conmutación (a tiempos diferentes) deben derivarse con ayuda de las ecuaciones de movimiento. Esto se aplica en general a todas las reglas de conmutación.

Las ecuaciones de Heisenberg son (véase ejercicio XVII.47):

$$\dot{\hat{a}}_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}, \hat{H}] = -i\omega_k \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + C_{\mathbf{k}\lambda}\left(\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^\dagger\right) \text{ y su adjunta,} \tag{XVII.420}$$

$$\dot{\hat{\sigma}} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\sigma}, \hat{H}] = -i\omega_0 \hat{\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\lambda} C_{\mathbf{k}\lambda}\left(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\right)\hat{\sigma}_3 \text{ y su adjunta,} \tag{XVII.421}$$

$$\dot{\hat{\sigma}}_3 = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\sigma}_3, \hat{H}] = -2\sum_{\mathbf{k}\lambda} C_{\mathbf{k}\lambda}\left(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}\right)\left(\hat{\sigma} + \hat{\sigma}^\dagger\right). \tag{XVII.422}$$

Estas ecuaciones muestran que, al desconectar la interacción (poniendo $C_{\mathbf{k}\lambda} = 0$), las variables $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$ y $\hat{\sigma}$, así como sus adjuntas, se comportan como osciladores armónicos independientes; no así $\hat{\sigma}_3$, que evoluciona sólo como consecuencia del acoplamiento. Por ejemplo, la solución formal de (XVII.420) puede escribirse como

$$\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}(0)e^{-i\omega_k t} + C_{\mathbf{k}\lambda}\int_0^t \left(\hat{\sigma}(t') - \hat{\sigma}^\dagger(t')\right)e^{i\omega_k(t'-t)}dt'. \tag{XVII.423}$$

De esta expresión es claro que no hay razón para esperar que $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t)$ y $\hat{\sigma} = \hat{\sigma}(t')$, por ejemplo, conmuten para $t \neq t'$.

El término $C_{\mathbf{k}\lambda}\left(\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^\dagger\right)$ en la ecuación (XVII.420) que determina la evolución de $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$ proviene del conmutador (XVII.393) entre los operadores del campo. En otras palabras, para un campo no cuantizado este término no existe, y los efectos asociados a él simplemente no se dan. De todos estos efectos de la cuantización del campo, el más importante es quizá la aparición de las transiciones espontáneas, es decir, de una vida media finita para los estados atómicos excitados (recuérdese que la ecuación de Schrödinger predice que todos los estados excitados son estacionarios). Otros efectos debidos al acoplamiento materia-campo son los desplazamientos de las energías propias y su correlato, los corrimientos de las líneas espectrales (efecto Lamb, etc.), la posibilidad de oscilación de las poblaciones, etc.

* **XVII.30** Obtenga las ecuaciones de Heisenberg para un átomo de dos niveles que se acopla a un modo único del campo de radiación de frecuencia cercana a la de transición del átomo. Trabaje en la aproximación de onda rotatoria y desprecie los términos de segundo orden en el campo.

Las ecuaciones solicitadas siguen directamente de las del problema anterior, considerando un solo modo del campo de radiación de frecuencia ω, próxima a ω_0. El hamiltoniano del sistema se reduce en este caso, usando (XVII.413), a (omitimos por innecesarios los índices $\mathbf{k}$ y λ)

$$\hat{H} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0\hat{\sigma}_3 + \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a} + i\hbar C\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)\left(\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^\dagger\right). \tag{XVII.424}$$

La interacción contiene cuatro términos:

$$\left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)\left(\hat{\sigma}-\hat{\sigma}^\dagger\right)=\hat{a}\hat{\sigma}-\hat{a}\hat{\sigma}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}-\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}^\dagger. \tag{XVII.425}$$

De las ecuaciones (XVII.420) y (XVII.421) sigue que, en ausencia de acoplamiento, $\hat{a}$ es de la forma $\hat{a}(0)e^{-i\omega t}$ y, análogamente, $\hat{\sigma}=\hat{\sigma}(0)e^{-i\omega_0 t}$. Por lo tanto, para acoplamiento suficientemente débil, los términos $\hat{a}\hat{\sigma}$ y $\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}^\dagger$ oscilan rápidamente con frecuencia $|\omega_0+\omega|$, mientras que los términos $\hat{a}\hat{\sigma}^\dagger$ y $\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}$ oscilan con frecuencia notablemente más baja (de hecho, nula en resonancia exacta), $|\omega_0-\omega|$. En la aproximación de onda rotatoria se desprecian los términos que varían rápidamente frente a los que lo hacen con lentitud (que son las contribuciones resonantes o casi resonantes), como se explica en el problema XVII.26. Con esta aproximación se obtiene el hamiltoniano

$$\hat{H}=\tfrac{1}{2}\hbar\omega_0\hat{\sigma}_3+\hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}+i\hbar C\left(\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}-\hat{a}\hat{\sigma}^\dagger\right). \tag{XVII.426}$$

Éste es el llamado *modelo de Jaynes y Cummings*. El término $\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}$ contiene un operador de creación del campo y uno de descenso del átomo; a su vez, la interacción $\hat{a}\hat{\sigma}^\dagger$ describe la aniquilación de un fotón y la excitación del átomo. Sigue que, en la aproximación de onda rotatoria, la excitación atómica siempre va acompañada de la aniquilación de un fotón (término $\hat{a}\hat{\sigma}^\dagger$), y la desexcitación, de la producción de un fotón (término $\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}$). Éste no sería el caso si se conservaran los términos previamente despreciados $\hat{a}\hat{\sigma}$ y $\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}^\dagger$. Debido a esta propiedad, en resonancia ($\omega=\omega_0$) el operador

$$\hat{N}(t)=\tfrac{1}{2}\hat{\sigma}_3+\hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t) \tag{XVII.427}$$

es una integral de movimiento, con valor propio $n\pm\frac{1}{2}$ (n es el número de fotones).[12]

Las ecuaciones de movimiento son las ecuaciones de Heisenberg para los operadores $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$, $\hat{\sigma}_3$, $\hat{\sigma}$ y $\hat{\sigma}^\dagger$. Con ayuda de las relaciones de conmutación establecidas en el problema anterior se obtiene, por ejemplo (véase ejercicio XVII.47),

$$\dot{\hat{a}}=-i\omega a+C\hat{\sigma}, \tag{XVII.428}$$

$$\dot{\hat{\sigma}}=-i\omega\sigma+C\hat{a}\hat{\sigma}_3, \tag{XVII.429}$$

$$\dot{\hat{\sigma}}_3=-2C\left(\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}-\hat{a}\sigma^\dagger\right). \tag{XVII.430}$$

** **XVII.31** En el texto hay la siguiente contradicción aparente: En el capítulo 1 del texto se discute la ecuación de Einstein para el efecto fotoeléctrico $\hbar\omega=T_{\text{máx}}+\Phi$, en donde Φ representa la función de trabajo del fotocátodo y $T_{\text{máx}}$ la máxima energía cinética de los fotoelectrones, y se muestra el papel importante que esta expresión jugó como ejemplo de la necesidad de considerar la estructura discreta (fotónica) de la luz de muy baja intensidad. Por otra parte, en la sección 17.6 del texto se estudia el efecto fotoeléctrico tomando al campo que incide sobre el fotocátodo como clásico, y se obtienen resultados correctos. Trate de resolver esta contradicción.

La dificultad de este problema no reside en las matemáticas requeridas para su solución, que son relativamente simples, sino en la necesidad de abandonar ideas muy extendidas para estar en condiciones de llegar a la respuesta, que está en la observación de que la fórmula de Einstein se puede derivar usando sólo mecánica cuántica, es decir, considerando la interacción de átomos *cuantizados* con el

[12] Mayores detalles pueden verse en Milonni (1994), capítulo 6.

campo electromagnético *clásico*. En otras palabras, para llegar a esta fórmula no es necesario introducir la noción de campo cuantizado. Para ver esto, recordemos que en la sección 17.4 del texto se muestra que la probabilidad de transición por unidad de tiempo entre dos eigenestados k y n debida a una perturbación periódica de la forma$\mathcal{H}^{\pm}e^{\pm i\omega t}$ está dada por la expresión

$$W_{nk}^{\pm} = \frac{4}{\hbar^2}\left|\mathcal{H}_{kn}^{\pm}\right|^2 \frac{\operatorname{sen}^2 \frac{1}{2}\left(\omega_{kn} \pm \omega\right) t}{\left(\omega_{kn} \pm \omega\right)^2 t}. \tag{XVII.431}$$

La contribución importante a esta probabilidad proviene del término resonante, para el que se cumple que

$$\omega_{kn} \pm \omega = 0, \tag{XVII.432}$$

ya sea que se trate de absorción (que es el caso de interés presente) o de emisión. La dispersión de la energía predicha por la ecuación (XVII.431) es del orden $|\Delta E| \sim h/t$, cantidad que para tiempos del orden de los de detección (e incluso mucho menores) resulta muy pequeña comparada con las energías involucradas. Con $E_k > 0$, la energía del electrón liberado y $E_n = E_0$ la energía del estado base del átomo, esta condición se escribe

$$\Delta E \equiv E_k - E_0 = \hbar\omega. \tag{XVII.433}$$

En el caso ideal, una parte Φ de la energía ΔE transferida al átomo es utilizada para llevarlo al borde de la ionización y el resto la adquiere el electrón como energía cinética, $T_{\text{máx}}$, por lo que debemos poner $\Delta E = T_{\text{máx}} + \Phi$, lo que combinado con (XVII.433) conduce a la fórmula de Einstein:

$$\hbar\omega = T_{\text{máx}} + \Phi. \tag{XVII.434}$$

En otros casos (los más) parte de la energía es transferida a otros procesos, y habría que sustraerla de ambos lados de la ecuación (XVII.434), por lo que ésta no se modifica.

El resultado muestra que la noción de fotón es dispensable en el presente caso y en un gran número de fenómenos que dependen de la detección de fotoelectrones. Resultados similares se han obtenido para algunas otras situaciones, como, por ejemplo, claramente sucede con la absorción y la emisión estimuladas. Sin embargo, no debe concluirse que esto descarta al fotón como una estructura del campo, pues las propiedades cuánticas del campo de radiación se manifiestan de manera observable en diversas circunstancias.[13]

En ausencia de una teoría cuántica de la materia y, en particular, siendo desconocida la fórmula de Bohr para las frecuencias de transición $E_k - E_n = \hbar\omega_{kn}$, como era el caso en 1905, la interpretación propuesta por Einstein de la ecuación (XVII.434) se siente la más plausible. Lo que llama más la atención es el hecho de que, pese a que el resultado anterior ha sido conocido por muchos años (fue derivado por L. Mandel, E.G.C. Sudarshan y E. Wolf en 1964 y redescubierto por W. E. Lamb y M. O. Scully en 1968 en *Phys. Rev.*), el efecto fotoeléctrico se sigue discutiendo como resultado de la cuantización del campo de radiación, y no de la materia.

[13]Una discusión de las teorías semiclásicas (campo de radiación no cuantizado) puede verse en L. Mandel, en *Progress in Optics*, E. Wolf, editor, volumen XIII (North-Holland, Amsterdam, 1976).

XVII.3. Ejercicios

XVII.32 ¿Cuál es la razón por la que en el problema XVII.3 cada función de prueba predice la relación correcta $\langle \hat{p}^2 \rangle = m^2\omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle$, pese a que por separado cada una de las cantidades $\langle \hat{x}^2 \rangle$ y $\langle \hat{p}^2 \rangle$ queda determinada sólo de manera aproximada?

XVII.33 Demuestre que la restricción $b < a$ utilizada al aplicar el método variacional en el problema XVII.6 es consistente con los resultados del análisis del mismo problema usando el método WKB.

XVII.34 Verifique detalladamente el resultado dado en (XVII.251).

XVII.35 Verifique detalladamente el resultado dado en (XVII.259).

XVII.36 Aplique el método variacional para determinar la energía del estado base y del primer estado excitado de una partícula que se mueve sobre una recta, bajo la acción de una fuerza atractiva de módulo constante. Como comparación, en unidades $2m_0 = \hbar = |F| = 1$, los eigenvalores correctos son $E_0 = 1.01879\ldots$, $E_1 = 2.33810\ldots$ *Sugerencia*: utilice funciones de oscilador armónico de frecuencia apropiada como funciones de prueba.

XVII.37 Determine variacionalmente la energía del estado base de partículas ligadas por el potencial

$$V(x) = -V_0 e^{-x^2/a^2}, \quad V_0 > 0.$$

Se sugiere emplear una función de prueba gaussiana. Estudie en particular el comportamiento de la energía en el caso de un pozo profundo, con $V_0 \gg \hbar^2/2m_0a^2$.

XVII.38 Use el método variacional para estimar la energía del estado base de partículas en un pozo rectangular infinito de ancho $2L$, centrado en el origen, empleando funciones de prueba del tipo

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x^2 > a^2, \\ x^2 - a^2, & x^2 < a^2 \end{cases}, \quad 0 < a < L.$$

XVII.39 Derive detalladamente la expresión (XVII.282).

XVII.40 En la sección 17.5 del texto se muestra que la probabilidad de emisión de radiación inducida con transición entre eigenestados atómicos k y n es proporcional a $\left|\langle n| e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{p} |k\rangle\right|^2$, donde $\boldsymbol{\epsilon}$ es el vector de polarización de la radiación emitida (ecuación (T17.84)). Cuando se hace la aproximación de onda larga $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \to 1$ se obtiene la radiación dipolar eléctrica, proporcional a $|\langle n| \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{p} |k\rangle|^2 = m_0^2\omega_{nk}^2 |\langle n| \boldsymbol{\epsilon} \cdot r |k\rangle|^2$; en la siguiente aproximación se obtiene la radiación cuadrupolar, proporcional a $|\langle n| (-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{p} |k\rangle|^2$, y así sucesivamente. De aquí sigue que las reglas de selección de la radiación cuadrupolar se derivan de las propiedades de los elementos de matriz atómicos del tipo $\langle n| x\frac{\partial}{\partial y} |k\rangle$, etc.

a) Demuestre que

$$\langle n| x\frac{\partial}{\partial y} + y\frac{\partial}{\partial x} |k\rangle = \frac{m_0}{\hbar^2} (E_k - E_n) \langle n| xy |k\rangle ,$$

$$-i\hbar \langle n| x\frac{\partial}{\partial y} |k\rangle = -\tfrac{1}{2} i m_0 \omega_{kn} \langle n| xy |k\rangle + \tfrac{1}{2} \langle n| \hat{L}_z |k\rangle .$$

El primer término de esta última expresión da lugar a la *radiación cuadrupolar eléctrica* ($E2$), mientras que el segundo, a la *radiación dipolar magnética* ($M1$).

b) Escribiendo los productos del tipo xy, etc., en términos de los armónicos esféricos, los elementos de matriz del tipo $\langle n|\, xy\, |k\rangle$, etc., se anulan, a menos que se cumplan las reglas de selección

$$\begin{aligned} \Delta l &= 0, \pm 2 \text{ si } l_k \neq 0; \quad l_n = 2 \text{ si } l_k = 0, \\ \Delta m &= 0, \pm 1, \pm 2. \end{aligned}$$

La radiación emitida por los sistemas cuánticos conforme a estas reglas es cuadrupolar eléctrica.

XVII.41 Haga una estimación general de la vida media de un estado excitado atómico.

XVII.42 Determine la dirección en que es más probable que se emita un electrón por la absorción de radiación γ de 50 keV.

XVII.43 Obtenga detalladamente el resultado final dado en la ecuación (XVII.289).

XVII.44 Verifique que la normalización de la función de onda (XVII.351) es preservada por las soluciones de la pareja de ecuaciones (XVII.356)–(XVII.357).

XVII.45 Considere la pareja de ecuaciones (XVII.356)–(XVII.357) para el caso de un campo electrostático. Demuestre que para un átomo que se encuentra en el estado inferior en $t = 0$ se cumple que

$$|C_2|^2 = \frac{4\,|\mathcal{V}|^2}{\omega_0^2 + 4\,|\mathcal{V}|^2} \operatorname{sen}^2 \tfrac{1}{2} \left(\omega_0^2 + 4\,|\mathcal{V}|^2\right)^{1/2} t.$$

XVII.46 Obtenga detalladamente la solución (XVII.375) para los dos osciladores acoplados. Calcule los valores esperados de x, y, x^2, y^2, xy y la energía, usando la solución exacta y la de Hartree-Fock, y compare los resultados. ¿Cuál es el significado de la energía corregida en la ecuación de Hartree-Fock (XVII.379) para cada cuasipartícula?

XVII.47 Derive detalladamente las ecuaciones de movimiento (XVII.420) – (XVII.422).

XVII.48 Considere el modelo estudiado en el problema XVII.29 para el caso en que el sistema se encuentra inicialmente en el estado $|+\rangle\,|n\rangle$. Derive la ecuación de movimiento

$$\ddot{\hat{\sigma}}_3 + 2C^2\hat{\sigma}_3 + 4C^2\hat{\sigma}_3 N(t) = 0$$

y demuestre que

$$\begin{aligned} \langle \hat{\sigma}_3 \rangle &= \cos 2C\sqrt{n+1}t, \\ \left\langle a^\dagger a \right\rangle &= n + \operatorname{sen}^2 C\sqrt{n+1}t, \\ P_2 = 1 - P_1 &= \cos^2 C\sqrt{n+1}t, \end{aligned}$$

donde P_1, P_2 son las poblaciones de los niveles atómicos. La frecuencia de oscilación entre niveles generada por la interacción $\omega_R = C\sqrt{n+1}$ es la llamada *frecuencia de Rabi*. En el límite $n \to 0$ esta frecuencia se reduce a $\omega_R^0 = C$, que sigue siendo diferente de cero (llamada *frecuencia de Rabi del vacío*). Por lo contrario, en un cálculo clásico en vez de $n+1 \to 1$ se obtendría simplemente $n \to 0$, y el estado inicial superior permanecería estable. En otras palabras, la teoría clásica es incapaz de predecir el decaimiento espontáneo de los estados excitados.

XVII.49 Resuelva el problema XVII.19 con el método variacional utilizando la función de prueba $\psi(x) = Ax^s e^{-\beta x}$. Determine el rango de valores de s para el cual: a) el valor esperado de la energía cinética es positivo; b) es aplicable el método variacional; c) la relación entre la predicción dada por el método variacional y la exacta para la energía del estado base; d) la mejor predicción posible para esta energía; e) la correspondiente función de prueba óptima. Compare estos resultados con los obtenidos en el problema XVII.19 para $s = 1$.

XVII.50 Calcule la probabilidad de que un electrón en un átomo realice una transición entre estados estacionarios por la influencia de una partícula cargada que pasa cerca del átomo.

XVII.51 Un oscilador unidimensional originalmente en reposo es sometido a una fuerza $f(t)$. Encuentre la ecuación de movimiento del centro del paquete de onda utilizando la teoría de perturbaciones a primer orden y compare con el resultado exacto.

XVII.52 Demuestre que en la teoría cuántica, así como en la teoría clásica, un oscilador armónico lineal cargado puede absorber o emitir radiación sólo de una frecuencia igual a su frecuencia clásica.

XVIII. Estructura atómica. Modelo de capas nuclear

XVIII.1. Problemas del texto

XVIII.1 Los átomos neutros de F, Ca y Rb tienen 9, 20 y 37 electrones, respectivamente. ¿Cuál es su configuración electrónica en el estado base? ¿Qué propiedades físicas y químicas fundamentales pueden preverse para ellos?

Como se muestra en la sección 18.1 del texto, el orden empírico en que aparecen los niveles a llenar por los electrones atómicos es

$$1s\ 2s\ 2p\ 3\,s\ 3p\ \ (4s\ \ 3d)\ \ 4p\ \ (5s\ 4d)\ \ 5p\ (6s\ 5d\ 4f\ 5d)\ 6p\ (7s\ 6d\ 5f\ 6d),$$

donde los paréntesis señalan las inversiones respecto al orden natural. Como es usual, a las subcapas s, p, d, f les corresponden los valores $l = 0, 1, 2, 3$ del momento angular, respectivamente. Como el número máximo de electrones que caben en cada subcapa es $2(2l + 1)$ (es decir, 2, 6, 10, 14, etc.), para el flúor (F), con sus 9 electrones, la configuración electrónica de mínima energía resulta ser $1s^2 2s^2 2p^5$. Como falta un electrón para completar la capa externa, el flúor pertenece a la clase de los no metales y, más específicamente, al grupo de los halógenos, y debe participar en las reacciones químicas con valencia negativa iónica, es decir, formar fácilmente iones negativos (aniones) por adquisición de un electrón suplementario. De hecho, el F es el elemento más electronegativo de la tabla periódica. Al faltarle sólo un electrón para completar su capa externa, ha de poder formar compuestos iónicos con los metales alcalinos.

El calcio (Ca) tiene 20 electrones, por lo que en su estado base su configuración electrónica es $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2$. La capa externa contiene dos electrones, los que debe poder ceder fácilmente en una unión electrovalente, convirtiéndose en ion con configuración de gas noble. Debido a que posee estos dos electrones de valencia, debe considerársele entre los metales, y más específicamente, entre los alcalinotérreos.

El rubidio (Rb) tiene 37 electrones. Su configuración electrónica es entonces $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^6\ 5s^1$. Como tiene llena la subcapa $3d$, pertenece al grupo de los metales. Su capa externa tiene un solo electrón, por lo que es monovalente y pertenece al grupo de los metales alcalinos.

XVIII.2 Deduzca detalladamente la ecuación (T18.1) para el movimiento interno de N cuerpos.

La ecuación (T18.1) a derivar corresponde a la ecuación de Schrödinger que describe el movimiento relativo de N cuerpos, una vez eliminado el movimiento del centro de masa. Para obtenerla se construye el hamiltoniano de un sistema constituido por N electrones y su núcleo, como la suma del hamiltoniano de cada partícula tomada como independiente, más el hamiltoniano de interacción. En el caso en que el potencial de interacción depende sólo de la posición de las partículas se obtiene

$$\begin{aligned}\hat{H}\left(\hat{\mathbf{p}}_0, \hat{\mathbf{p}}_1, \ldots \hat{\mathbf{p}}_N, \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_{e_1}, \ldots \mathbf{r}_{e_N}\right) \\ = \hat{H}_0\left(\hat{\mathbf{p}}_0, \mathbf{r}_0\right) + \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i\left(\hat{\mathbf{p}}_i, \mathbf{r}_{e_i}\right) + V\left(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_{e_1}, \ldots \mathbf{r}_{e_N}\right), \end{aligned} \tag{XVIII.1}$$

donde los subíndices 0 y e_i, $i = 1, 2, \ldots, N$, se refieren al núcleo y al i-ésimo electrón, respectivamente. Los hamiltonianos $\hat{H}_0$, $\hat{H}_i$ pueden escribirse a su vez en la forma

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_0^2 + V_0\left(\mathbf{r}_0\right), \tag{XVIII.2}$$

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_{e_i}^2 + V_i\left(\mathbf{r}_{e_i}\right), \qquad i = 1, \ldots, N. \tag{XVIII.3}$$

La ecuación estacionaria de Schrödinger para este sistema de $N+1$ partículas es

$$\begin{aligned} E\Psi \;=\; & \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_0^2 + V_0\left(\mathbf{r}_0\right)\right]\Psi \\ & + \sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_{e_i}^2 + V_i(\mathbf{r}_{e_i})\right]\Psi + V\left(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_{e_1}, \ldots, \mathbf{r}_{e_N}\right)\Psi. \end{aligned} \tag{XVIII.4}$$

Consideraremos que el sistema está aislado, es decir, que sólo actúa el potencial de interacción, y que éste es función únicamente de las posiciones relativas. Entonces la ecuación anterior se reduce a

$$E\Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_0^2 - \sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_{e_i}^2 + V\left(\mathbf{r}_{e_1} - \mathbf{r}_0, \ldots, \mathbf{r}_{e_N} - \mathbf{r}_0\right)\right]\Psi. \tag{XVIII.5}$$

La coordenada de centro de masa se define como

$$\mathbf{R} = \frac{M\mathbf{r}_0 + m_e\sum_{i=1}^{N}\mathbf{r}_{e_i}}{M + Nm_e}, \tag{XVIII.6}$$

mientras que las coordenadas de los electrones relativas al núcleo son (como se tomó en (XVIII.5))

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{e_i} - \mathbf{r}_0\,. \tag{XVIII.7}$$

Usando estas definiciones se obtiene

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x_{e_i}} = \frac{\partial\Psi}{\partial R_x}\frac{\partial R_x}{\partial x_{e_i}} + \sum_{j=1}^{N}\frac{\partial\Psi}{\partial x_j}\frac{\partial x_j}{\partial x_{e_i}} = \frac{m_e}{M + Nm_e}\frac{\partial\Psi}{\partial R_x} + \frac{\partial\Psi}{\partial x_i}, \tag{XVIII.8}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_{e_i}^2} = \left(\frac{m_e}{M+Nm_e}\right)^2 \frac{\partial^2\Psi}{\partial R_x^2} + \frac{2m_e}{M+Nm_e}\frac{\partial^2\Psi}{\partial R_x \partial x_i} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial x_i^2}, \tag{XVIII.9}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x_0} = \frac{\partial\Psi}{\partial R_x}\frac{\partial R_x}{\partial x_0} + \sum_{j=1}^{N}\frac{\partial\Psi}{\partial x_j}\frac{\partial x_j}{\partial x_0} = \frac{M}{M+Nm_e}\frac{\partial\Psi}{\partial R_x} - \sum_{i=1}^{N}\frac{\partial\Psi}{\partial x_i}, \tag{XVIII.10}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_0^2} = \left(\frac{M}{M+Nm_e}\right)^2 \frac{\partial^2\Psi}{\partial R_x^2} - \frac{2M}{M+Nm_e}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial^2\Psi}{\partial R_x \partial x_i} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_i \partial x_j}. \tag{XVIII.11}$$

Con esto la contribución de las componentes x a la ecuación de Schrödinger se transforma en

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{M}\frac{\partial^2}{\partial x_0^2} + \frac{1}{m_e}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial x_{e_i}^2}\right)\Psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{M+Nm_e}{(M+Nm_e)^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial R_x^2} + \frac{1}{m_e}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_i^2} + \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_i \partial x_j}\right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{1}{M+Nm_e}\frac{\partial^2\Psi}{\partial R_x^2} + \left(\frac{1}{m_e}+\frac{1}{M}\right)\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_i^2} + \frac{2}{M}\sum_{i>j}^{N}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_i \partial x_j}\right]. \end{aligned} \tag{XVIII.12}$$

Para las componentes y y z se obtiene una expresión similar, y la ecuación (XVIII.5) toma la forma

$$\begin{aligned} E\Psi = &\left(-\frac{\hbar^2}{2\left(M+Nm_e\right)}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2\right)\Psi \\ &-\frac{\hbar^2}{M}\sum_{i>j}^{N}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} + \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j}\right)\Psi + V\left(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\right)\Psi, \end{aligned} \tag{XVIII.13}$$

donde $\mu = m_e M/(m_e+M)$ es la masa reducida del sistema electrón-núcleo. La variable del CM se puede separar de esta ecuación escribiendo Ψ como el producto $\Psi\left(\mathbf{R},\mathbf{x}_i\right) = \Phi\left(\mathbf{R}\right)\psi\left(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\right)$, lo que conduce al par de ecuaciones desacopladas

$$E_R\Phi\left(\mathbf{R}\right) = -\frac{\hbar^2}{2M_T}\nabla_R^2\Phi\left(\mathbf{R}\right), \tag{XVIII.14}$$

$$\begin{aligned} E_r\psi\left(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\right) = &-\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2\psi\left(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\right) \\ &-\frac{\hbar^2}{M}\sum_{i>j}^{N}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}+\frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z_i \partial z_j}\right)\psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N) \\ &+V(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N)\,\psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N). \end{aligned} \tag{XVIII.15}$$

La primera de estas ecuaciones describe el movimiento libre de una cuasi-partícula de masa $M_T = (M+Nm_e)$, igual a la masa total del sistema, con variable de

posición $\mathbf{R}$, la coordenada del centro de masa. Este movimiento es irrelevante para el estudio de los niveles atómicos, y basta con pasar a un sistema de coordenadas en que el centro de masa se encuentre en reposo para que podamos tomar la solución trivial $E_R = 0$ y $\Phi(\mathbf{R}) = \text{cte}$. Haciéndolo, la ecuación de Schrödinger del problema de $N+1$ partículas se reduce al problema de Schrödinger para el movimiento relativo de N cuerpos de masa reducida $\mu = m_e M/(m_e + M)$. Esta ecuación es precisamente (XVIII.15), y corresponde a la ecuación solicitada (T18.1), es decir,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2\psi - \frac{\hbar^2}{M}\sum_{i>j}^{N}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z_i \partial z_j}\right)\psi + V\psi = E\psi. \quad \text{(XVIII.16)}$$

XVIII.3 Utilice la ecuación variacional (T18.22) para estimar la energía de disociación del H^- (ion negativo helioide con $Z = 1$). *Comentario*: la estimación que da esta fórmula es demasiado burda, pues predice que H^- es ligeramente inestable, aunque en realidad es estable.

La teoría presentada en la sección 18.2 del texto se aplica a átomos helioides, con Z arbitraria. En un átomo helioide se han liberado todos sus electrones menos dos, localizados en la capa K. Si se toma $Z = 1$ se trata, obviamente, de un ion negativo del hidrógeno, pues los dos electrones están ligados a un protón único.

Al sustituir $Z = 1$ en la ecuación (T18.22) que da la energía variacional de un átomo helioide en su estado base, se obtiene

$$E_{10}^{\text{var}} = -\alpha^2 mc^2 \left(1 - \tfrac{5}{16}\right)^2 = -12.86 \text{ eV}. \quad \text{(XVIII.17)}$$

El valor numérico se calcula rápidamente notando que $\alpha^2 mc^2$ es el doble del valor absoluto de la energía del estado base del hidrógeno, es decir, $\alpha^2 mc^2 = 27.2$ eV. En unidades atómicas, con $\alpha^2 mc^2 = e^4 m/\hbar^2 = 1$ ua, esta energía es

$$E_{10} = -0.473 \text{ ua}. \quad \text{(XVIII.18)}$$

Lo que nos interesa conocer es la energía de ionización del H^-, uno de los parámetros más importantes de un átomo. La facilidad con la que un átomo (usualmente neutro) cede un electrón mide, aunque sea sólo parcialmente, su grado de reactividad frente a otras especies; de aquí su importancia en la química. En el presente caso, al quitarle un electrón al ion H^-, en realidad estamos disociándolo, por lo que podemos tomar la energía de disociación como energía de ionización. Como se explica en la sección 18.2 del texto, esta energía está dada por

$$I = \alpha^2 mc^2 \left[\left(Z - \tfrac{5}{16}\right)^2 - \tfrac{1}{2}Z^2\right] \quad \text{(XVIII.19)}$$

y da, con $Z = 1$,

$$I = -0.744 \text{ eV} = -0.0273 \text{ ua}. \quad \text{(XVIII.20)}$$

Hemos obtenido un valor negativo para una cantidad que siempre es positiva, pues siempre hay que suministrar energía para liberar un electrón ligado a un átomo.[1] Un valor negativo implicaría que el ion helioide H^- es inestable (es decir, que gana energía al disociarse), cuando en la realidad este ion es estable. La razón de esta discrepancia radica en que la fórmula (XVIII.19) se derivó empleando una

[1] Mayores detalles pueden verse en Cruz, Chamizo y Garritz (1986).

función de prueba demasiado burda. Sin embargo, el resultado muestra que, en todo caso, la energía de disociación del ion H^- es pequeña, es decir, que pierde fácilmente su electrón extra.

XVIII.4 Demuestre directamente que $\langle \text{orto} \mid \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 \mid \text{para} \rangle$ es nulo para el átomo de He.

Construiremos las funciones de onda a orden cero del átomo de helio suponiendo que un electrón se encuentra en el estado $1s$, por lo que el otro se encuentra en un estado nl con $n \neq 1$. La función de onda orbital del ortohelio, cuyos electrones están acoplados a espín total $S = 0$, debe ser entonces la combinación simétrica de Ψ_{100} y Ψ_{nlm}; a su vez, para el parahelio, con $S = 1$, la combinación correcta es la antisimétrica. Por lo tanto, escribimos

$$\Psi_{nl} = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_{100}(\mathbf{r}_1)\, \Psi_{nlm}(\mathbf{r}_2) + \Psi_{100}(\mathbf{r}_2)\, \Psi_{nlm}(\mathbf{r}_1) \right] \chi_0 \tag{XVIII.21}$$

para $S = 0$, y

$$\Psi_{nl} = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_{100}(\mathbf{r}_1)\, \Psi_{nlm}(\mathbf{r}_2) - \Psi_{100}(\mathbf{r}_2)\, \Psi_{nlm}(\mathbf{r}_1) \right] \chi_1 \tag{XVIII.22}$$

para $S = 1$.

El elemento de matriz *orbital* $\langle \text{orto} \mid \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 \mid \text{para} \rangle$ para el átomo de helio resulta

$$\begin{aligned}
\langle \text{orto} \mid \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 \mid \text{para} \rangle \;=\; & \tfrac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \left[\Psi^*_{100}(\mathbf{r}_1)\, \Psi^*_{nlm}(\mathbf{r}_2) \right. \\
& \left. + \Psi^*_{100}(\mathbf{r}_2)\, \Psi^*_{nlm}(\mathbf{r}_1) \right] (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \\
& \times \left[\Psi_{100}(\mathbf{r}_1)\, \Psi_{nlm}(\mathbf{r}_2) - \Psi_{100}(\mathbf{r}_2)\, \Psi_{nlm}(\mathbf{r}_1) \right] \\
=\; & \tfrac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \left| \Psi_{100}(\mathbf{r}_1) \right|^2 (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \left| \Psi_{nlm}(\mathbf{r}_2) \right|^2 \\
& - \tfrac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \left| \Psi_{100}(\mathbf{r}_2) \right|^2 (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \left| \Psi_{nlm}(\mathbf{r}_1) \right|^2 \\
& - \tfrac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \Psi^*_{100}(\mathbf{r}_1)\, \Psi^*_{nlm}(\mathbf{r}_2)\, (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \\
& \times \Psi_{100}(\mathbf{r}_2)\, \Psi_{nlm}(\mathbf{r}_1) \\
& + \tfrac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \Psi^*_{100}(\mathbf{r}_2)\, \Psi^*_{nlm}(\mathbf{r}_1)\, (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \\
& \times \Psi_{100}(\mathbf{r}_1)\, \Psi_{nlm}(\mathbf{r}_2) \,.
\end{aligned} \tag{XVIII.23}$$

Como en cada una de las integrales pueden intercambiarse las variables $\mathbf{r}_1$ y $\mathbf{r}_2$ sin afectar los resultados, ellas se anulan por parejas, lo que conduce al resultado final

$$\langle \text{orto} \mid \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 \mid \text{para} \rangle = 0, \tag{XVIII.24}$$

que se puede extender a todos los elementos de matriz de funciones simétricas en $\mathbf{r}_1$ y $\mathbf{r}_2$. Esto significa, en particular, que no se realizan transiciones dipolares entre estados de orto y parahelio.

Es conveniente mencionar que el resultado (XVIII.24) se vuelve obvio cuando se consideran las funciones de onda completas, incluyendo el espín, pues los espinores $|\chi_0\rangle$ y $|\chi_1\rangle$ son mutuamente ortogonales.

* **XVIII.5** En la época de la espectroscopía atómica precuántica se observó que los niveles de energía están dados con gran precisión por la fórmula general de Rydberg

$$E = -\frac{R\hbar c}{(n-\delta)^2},$$

donde n es el número cuántico principal y δ es una cantidad llamada "defecto cuántico", que depende de l, pero no de n, y tiende a disminuir rápidamente conforme l aumenta. Por ejemplo, se encuentra experimentalmente que para los estados s, p, d, f del Cs, δ toma los valores aproximados 4.1, 3.7, 2.5, 0.02, respectivamente. Concentrando la atención en los electrones más externos o de valencia (que son los que determinan el espectro óptico), notamos que si $l < n-1$, las órbitas deben ser consideradas como elípticas (en el sentido discutido en el problema XIII.12) y penetran al interior del átomo, mientras que para $l = n-1$ las órbitas ("circulares") tienden a permanecer en el exterior. Esta observación sugiere que el defecto cuántico es una medida de la penetración del electrón externo al interior del átomo.

A partir de estas consideraciones, demuestre que δ está dada por la diferencia entre el valor de la integral de fase $\oint p_r dr$ para el electrón real y para el electrón hidrogenoide.

Antes de efectuar los cálculos solicitados, debe aclararse que conceptos como el de "órbita elíptica", "interior del átomo", etc., no tienen sentido preciso en la teoría cuántica, por lo que la explicación dada debe entenderse en sentido cualitativo. Sin embargo, una órbita s de un átomo complejo puede considerarse como "penetrante", en el sentido de que su función de onda no se anula en $r = 0$, es decir, el electrón posee una probabilidad significativa de visitar la región próxima al núcleo. A su vez, por electrón "externo" normalmente se entiende que se trata de un electrón de valencia.

Para dar un sentido más cuantitativo a las consideraciones del enunciado, pero sin entrar en cálculos demasiado engorrosos, consideremos como punto de partida la descripción de un electrón hidrogenoide que sigue de usar las reglas de cuantización de Wilson-Sommerfeld. El movimiento radial queda descrito por la integral de acción

$$\frac{1}{2\pi}\oint p_r dr = \frac{Ze^2 m_0}{4\pi\varepsilon_0\sqrt{-2m_0E}} - \left(l+\tfrac{1}{2}\right)\hbar = \left(n-\tfrac{1}{2}\right)\hbar. \qquad \text{(XVIII.25)}$$

(Con el objeto de obtener mejores resultados, se ha hecho el cambio $l(l+1) \to \left(l+\frac{1}{2}\right)^2$, de manera similar a como se hace para mejorar el método WKB.) Para órbitas no hidrogenoides el apantallamiento parcial de la carga nuclear modifica el valor de la integral de fase $\oint p_r dr$, debido a la consecuente modificación de la energía potencial y de los valores propios de la energía. Por esto debemos escribir en vez de (XVIII.25):

$$\frac{1}{2\pi}\oint p_r\, dr = \frac{Z_0 e^2 m_0}{4\pi\varepsilon_0\sqrt{-2m_0E}} - \left(l+\tfrac{1}{2}\right)\hbar + \hbar\delta = \left(n-\tfrac{1}{2}\right)\hbar, \qquad \text{(XVIII.26)}$$

donde hemos llamado $2\pi\hbar\delta$ a la corrección, con δ un coeficiente numérico que en primera aproximación depende sólo de l. En esta expresión debemos poner $Z_0 = 1$ si se trata de uno de los electrones de valencia de un átomo neutro; $Z_0 = 2$ si se trata de un electrón de valencia de un átomo una vez ionizado, y así sucesivamente. De esta manera garantizamos que se trata del campo hidrogenoide que

actúa sobre el electrón de valencia en la parte externa de la órbita. Es claro que el resultado (XVIII.26) equivale a hacer la sustitución $n \to n-\delta$, por lo que sigue que la energía debe escribirse en la forma

$$E_n = -\frac{Z_0^2 R\hbar c}{(n-\delta)^2}. \tag{XVIII.27}$$

Una manera de tratar este problema desde la perspectiva cuántica usual, se obtiene al considerar el efecto que la polarización de la nube electrónica ejerce sobre el espectro. Esta polarización es generada por la repulsión del electrón penetrante sobre los electrones internos, sumada a la atracción que ejerce sobre el núcleo. Esta fuerza está dada por la expresión

$$F^{(p)} = -(Z-1)e_0^2\left[\frac{1}{r^2} - \frac{1}{(r+x)^2}\right] \simeq -2(Z-1)e_0^2\frac{x}{r^3}, \tag{XVIII.28}$$

donde se ha considerado que el electrón externo se encuentra en la posición $r+x$. Identificando la cantidad $(Z-1)e_0x$ como la polarización p de la nube electrónica, obtenemos

$$F^{(p)} = -2e_0\frac{p}{r^3}. \tag{XVIII.29}$$

Por otro lado, la polarización también la podemos escribir en la forma

$$p = \beta\mathcal{E} = \frac{e_0\beta}{r^2}, \tag{XVIII.30}$$

donde β es la polarizabilidad de la nube y $\mathcal{E} = e_0/r^2$ representa el campo eléctrico generado por el electrón externo en el centro del átomo (despreciando x/r frente a la unidad, para una estimación a primer orden). Combinando las dos últimas expresiones, obtenemos para la energía potencial debida a la polarización

$$V^{(p)} = \int_r^\infty F^{(p)}dr = -2e_0^2\beta\int_r^\infty \frac{dr}{r^5} = -\frac{e_0^2\beta}{2r^4}, \tag{XVIII.31}$$

de donde la energía media de polarización es

$$\Delta E^{(p)} = -\frac{e_0^2\beta}{2}\left\langle\frac{1}{r^4}\right\rangle. \tag{XVIII.32}$$

El valor de $\left\langle r^{-4}\right\rangle$ se puede estimar como si se tratara de un átomo hidrogenoide. Con ayuda de las relaciones de recurrencia estudiadas en los problemas XIII.14 y XIII.15 se obtiene

$$\left\langle\frac{1}{r^4}\right\rangle = \frac{3}{2a_0^4}\frac{1}{n^3}\frac{1}{\left(l-\frac{1}{2}\right)l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)\left(l+\frac{3}{2}\right)}\left(1-\frac{l(l+1)}{3n^2}\right). \tag{XVIII.33}$$

De esta manera, la energía adicional de polarización se puede escribir en la forma

$$\Delta E_n^{(p)} = -\frac{e_0^2}{2a_0n^2}\frac{2\delta}{n} = E_n^{(0)}\frac{2\delta}{n}, \tag{XVIII.34}$$

donde

$$\delta = \frac{3\beta}{4a_0^3}\frac{1}{\left(l-\frac{1}{2}\right)l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)\left(l+\frac{3}{2}\right)}\left(1-\frac{l(l+1)}{3n^2}\right). \tag{XVIII.35}$$

Como la energía del nivel n la podemos escribir en la forma $E_n^{(0)} = -e_0^2/2a_0n^2 = -R\hbar c/n^2$, la energía corregida resulta dada por una expresión que justifica la descubierta empíricamente por los espectroscopistas y que coincide con (XVIII.27) (con $Z_0 = 1$), es decir,

$$E_n = -\frac{R\hbar c}{n^2}\left(1 + \frac{2\delta}{n}\right) = -\frac{R\hbar c}{(n-\delta)^2}. \tag{XVIII.36}$$

La fórmula obtenida tendría aún que corregirse tomando en cuenta los efectos debidos al espín electrónico. La ecuación (XVIII.35) muestra que el defecto cuántico δ depende fuertemente del valor del momento angular, siendo más significativo para valores pequeños de l, dado un valor de n, y tendiendo a decrecer como l^{-5} para l grande. Estos resultados se encuentran en concordancia, por ejemplo, con los datos empíricos del Cs listados en el enunciado del problema. Sin embargo, la fórmula no es usable para los estados s, pues diverge para $l = 0$. Esto hace necesario realizar un estudio particular para este caso.

La inaplicabilidad del resultado precedente para $l = 0$ se debe a que los electrones s tienen una probabilidad muy alta de encontrarse en el interior de la nube polarizada, lo que hace perder sentido a las aproximaciones usadas en su derivación. El problema se corrige observando que, en este caso, el efecto fundamental proviene del hecho de que la nube está distribuida, por lo que la corrección dominante queda dada por el valor esperado de la diferencia de la energía potencial de los electrones distribuidos sobre un volumen apropiado, y la de la carga equivalente de ellos, pero considerada como concentrada en el centro del átomo. Para una estimación del orden de magnitud de la corrección es suficiente considerar a los $Z - 1$ electrones de la nube como distribuidos uniformemente dentro de una esfera de radio R (que juega el papel de radio atómico efectivo), lo que conduce a

$$\Delta E_n^{(\mathrm{dist})} = \left\langle -\frac{(Z-1)\,e_0^2}{r}\left(1 - \frac{3r}{2R} + \frac{r^3}{2R^3}\right)\right\rangle. \tag{XVIII.37}$$

El cálculo se simplifica mucho si en vez de la función de onda $\psi_{n00}(r)$ se toma su valor en el origen, $(\pi a_0^3 n^3)^{-1/2}$; de esta manera se obtiene

$$\Delta E_n^{(\mathrm{dist})} = -\frac{2Ze_0^2R^2}{5a_0^3n^3}. \tag{XVIII.38}$$

En el problema ilustrativo 17.4 del texto se muestra que el radio atómico estimado con el modelo de Thomas-Fermi es

$$R = \gamma\frac{a_0}{Z^{1/3}}, \tag{XVIII.39}$$

donde γ representa una constante del orden de la unidad, determinada por los detalles de la distribución. Esta expresión da para la corrección de la energía de los estados s

$$\Delta E_n^{(\mathrm{dist})} = -\frac{e_0^2}{2a_0n^2}\frac{2\delta_0}{n} = E_n^{(0)}\frac{2\delta_0}{n}, \tag{XVIII.40}$$

donde

$$\delta_0 = \frac{2Z}{5}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2 \simeq \frac{2}{5}\gamma^2 Z^{1/3}. \tag{XVIII.41}$$

Esta fórmula predice valores para δ_0 del orden de la unidad o mayores. La energía corregida de los estados s resulta de esta manera

$$E_n = -\frac{R\hbar c}{(n-\delta_0)^2}. \tag{XVIII.42}$$

Naturalmente, para el hidrógeno, con su electrón único, todas estas correcciones son nulas.

XVIII.6 Considere un oscilador armónico tridimensional isotrópico, como el estudiado en el problema XIII.10. Demuestre que en la capa N (N es el número cuántico principal) caben $(N+1)(N+2)$ partículas iguales de espín $1/2$. Utilice esta información para demostrar que los números mágicos nucleares predichos por el modelo de oscilador armónico son 2, 8, 20, 40, 70, 112.

El oscilador armónico tridimensional isotrópico se estudió en el problema XIII.10, donde se demostró que el grado de degeneración de un nivel con número cuántico principal N, con

$$N = 2n + l, \quad n, l = 0, 1, 2, \ldots, \tag{XVIII.43}$$

es $g_N = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)$ (ecuación (XIII.109)). En el cálculo de g_N no se tomó en cuenta el espín del electrón, por lo que la degeneración total del nivel N, incluido el espín, es

$$g_{NS} = 2g_N = (N+1)(N+2). \tag{XVIII.44}$$

Se acostumbra denotar los estados estacionarios del oscilador armónico tridimensional poniendo enfrente de las literales s, p, d, f, etc., correspondientes al valor del momento angular $l = 0$, 1, 2, 3, ..., como es usual, un número que es igual a $n+1$. Por ejemplo, el estado $1s$ corresponde a $n = l = 0$; el estado $2p$ corresponde a $n = 1$, $l = 1$, y así sucesivamente. El cálculo de los números mágicos parte del hecho de que en un eigenestado con n y l dadas es posible acomodar $2(2l+1)$ partículas de espín $\frac{1}{2}$ y que los números mágicos representan el total de electrones que es posible acomodar entre las diversas capas.

En la capa $N = 0$ caben 2 electrones, y el primer número mágico resulta 2. En la capa $N = 1$ ($l = 1$) caben 6 estados diferentes, y el segundo número mágico es $2 + 6 = 8$. Para $N = 2$ se pueden acomodar 12 partículas (pues contiene los estados $2s$ y $1d$), por lo que el tercer número mágico es $8 + 12 = 20$. En la capa $N = 3$ (estados $2p$ y $1f$) podemos acomodar 20 partículas, y el siguiente número mágico es $20 + 20 = 40$. En la capa $N = 4$ caben 30 electrones, y se obtiene para el siguiente número mágico $40 + 30 = 70$. En la capa $N = 5$ caben 42 partículas adicionales, y el siguiente número mágico es $70 + 42 = 112$.

Los datos anteriores, así como los correspondientes eigenvalores de la energía, se encuentran listados en el cuadro XVIII.1.

XVIII.2. Problemas adicionales

XVIII.7 Determine la relación que existe para las cargas eléctricas, masas, longitudes, velocidades, tiempo y energía expresadas en los sistemas de unidades internacional y atómico.

$E/\hbar\omega$	N	$(n+1)\,l$	N_{elec}	$N_{\text{mág}}$
3/2	0	$1s$	2	2
5/2	1	$1p$	6	8
7/2	2	$2s, 1d$	12	20
9/2	3	$2p, 1f$	20	40
11/2	4	$3s, 2d, 1g$	30	70
14/2	5	$3p, 2f, 1h$	42	112

CUADRO XVIII.1 *Números mágicos para el modelo de oscilador armónico*

En el sistema atómico se toman como unidades de carga y masa el valor absoluto de la carga y la masa del electrón en reposo, e_0 y m_0; como unidad de longitud se toma el primer radio de Bohr, $a_0 = \hbar^2/m_0e^2$. La unidad de tiempo del sistema atómico se fija a partir de la selección $\hbar = 1$. De aquí siguen directamente las equivalencias dadas más abajo.

De la fórmula para la constante de estructura fina $\alpha = e^2/\hbar c$ sigue que la velocidad de la luz es $c = 1/\alpha = 137.036\ldots$ La velocidad orbital del electrón en la primera órbita de Bohr es $v_0 = e^2/\hbar = 1$, de donde la unidad atómica de tiempo resulta a_0/v_0. Alternativamente, podemos considerar que la elección $\hbar = 1$ fija la unidad de momento angular, lo que determina la unidad del producto $m_0a_0v_0 = \hbar$ y lleva a que $v_0 = \hbar/m_0a_0 = e_0^2/\hbar = \alpha c = 1$. Como unidad de energía se toma la energía coulombiana entre dos electrones separados una unidad atómica de longitud; a esta unidad con frecuencia se le llama *hartree*. Con esto, la energía del estado base del átomo de hidrógeno resulta igual a 0.5 ua = 0.5 hartree.

Las equivalencias anteriores se resumen en el siguiente cuadro

1 ua de carga	=	e_0	=	1.602189×10^{-19}	C
1 ua de masa	=	m_0	=	9.10953×10^{-31}	kg
1 ua de longitud	=	a_0	=	5.291771×10^{-11}	m
1 ua de velocidad	=	$v_0 = e_0^2/\hbar$	=	2.1877×10^{6}	m/s
1 ua de momento angular	=	$\hbar$	=	1.054589×10^{-34}	J · s
1 ua de tiempo	=	a_0/v_0	=	2.4189×10^{-17}	s
1 ua de energía (hartree)	=	$\kappa e_0^2/a_0$	=	4.3598×10^{-18}	J

* **XVIII.8** El núcleo de un átomo de tritio que se encuentra en su estado base experimenta un decaimiento β. Determine la probabilidad de que el átomo de helio producido por el decaimiento se encuentre en su estado base.

Cuando un núcleo de tritio (que contiene un protón y dos neutrones) emite un electrón por decaimiento β, se transforma en núcleo de He^3 (con 2 protones y un neutrón). El efecto dominante de esta trasmutación sobre los electrones atómicos es el asociado al cambio brusco de la energía potencial de $-e^2/r$ a $-2e^2/r$. Una cota superior para el tiempo requerido para que se realice este cambio la da el tiempo que se requiere para que el electrón emitido abandone el átomo, que es del orden de a_0/v, donde v es la velocidad del electrón β. Como la energía de este electrón es del orden de keV, su velocidad se puede estimar como del orden de $\alpha c = e^2/\hbar$, con lo que el tiempo de vuelo resulta menor que $\hbar^3/m_0e^4 = 1$ ua, es decir, inferior a un periodo atómico, lapso durante el cual

el electrón atómico no puede alterar sustancialmente su estado. Esto verifica que es correcto considerar como brusco el cambio del potencial nuclear. Sin embargo, por ser este cambio muy significativo, el problema no puede tratarse con métodos perturbativos.

Supondremos que la función de onda del electrón emitido posee simetría esférica, es decir, que existe igual posibilidad de emisión en todas las direcciones. Esta función de onda la podemos expresar en términos de los estados propios del electrón moviéndose en el campo de dos protones ($Z = 2$), lo que da

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n + \int c(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}} d\mathbf{k}. \tag{XVIII.45}$$

Es importante que el presente desarrollo contenga tanto los estados discretos, como los del continuo, es decir, la base completa. Invirtiendo se obtiene para los coeficientes

$$c_n = \int \psi \psi_n^* d^3x, \tag{XVIII.46}$$

$$c(\mathbf{k}) = \int \psi \psi_{\mathbf{k}}^* d^3x. \tag{XVIII.47}$$

Debido a la simetría esférica de ψ, estos coeficientes son diferentes de cero sólo para estados s, por lo que las funciones de onda de interés contienen sólo dependencia radial.

La probabilidad de que después del decaimiento el electrón se encuentre en el estado estacionario n es $w_n = |c_n|^2$; de esta consideración sigue que

$$w_{\text{exc}} = \sum_{n=2}^{\infty} w_n = \sum_{n=2}^{\infty} |c_n|^2 \tag{XVIII.48}$$

es la probabilidad de excitación, mientras que $w_1 = |c_1|^2$ es la probabilidad de que el nuevo átomo se encuentre en su estado base. A su vez,

$$w_{\text{ion}} = \int |c(\mathbf{k})|^2 \, d^3k \tag{XVIII.49}$$

es la probabilidad de ionización del átomo (es decir, de que el electrón se encuentre en algún estado no ligado).

Para el cálculo explícito de los coeficientes del desarrollo es conveniente utilizar las funciones radiales hidrogenoides expresadas en términos de funciones hipergeométricas confluentes, de tal forma que ponemos, utilizando unidades atómicas (véase ejercicio XVIII.25),

$$R_{n0}^{(Z)} = 2 \left(\frac{Z}{n} \right)^{3/2} e^{-Zr/n} F \left(-n+1, 2; \frac{2Zr}{n} \right). \tag{XVIII.50}$$

De aquí sigue que

$$\begin{aligned} c_n &= \int_0^{\infty} R_{n0}^{(Z)} R_{n0}^{(Z')} r^2 dr \\ &= \left(\frac{nZ'}{Z} \right)^{3/2} \left(\frac{2Z}{nZ'+Z} \right)^3 F \left(-n+1, 3, 2; \frac{2Z}{nZ'+Z} \right), \end{aligned} \tag{XVIII.51}$$

donde $F(\alpha, \beta, \gamma; z)$ es una función hipergeométrica. En el caso presente debemos poner $Z = 2$, $Z' = 1$, y se obtiene

$$c_n = \left(\frac{n}{2}\right)^{3/2} \left(\frac{4}{n+2}\right)^3 F\left(-n+1, 3, 2; \frac{4}{n+2}\right). \tag{XVIII.52}$$

Usando las fórmulas para las funciones hipergeométricas

$$F(\alpha, \beta, \gamma; z) = (1-z)^{\gamma-\alpha-\beta} F(\gamma-\alpha, \gamma-\beta, \gamma; z), \tag{XVIII.53}$$

$$F(\alpha, \beta, \gamma; z) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma}\frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!} + \cdots, \tag{XVIII.54}$$

se ve de inmediato que la serie se corta en el segundo término debido a que $\gamma - \beta = -1$, por lo que queda

$$F(-n+1, 3, 2; x) = (1-x)^{n-2}\left(1 - \frac{n+1}{2}x\right). \tag{XVIII.55}$$

Poniendo $x = 4/(n+2)$ sigue que

$$F\left(-n+1, 3, 2; \frac{4}{n+2}\right) = \frac{-n}{n+2}\left(\frac{n-2}{n+2}\right)^{n-2}. \tag{XVIII.56}$$

De esta forma se obtiene

$$c_n = -\frac{2^5}{\sqrt{2}} n^{5/2} \frac{(n-2)^{n-2}}{(n+2)^{n+2}} \tag{XVIII.57}$$

y

$$w_n = 2^9 n^5 \frac{(n-2)^{2n-4}}{(n+2)^{2n+4}}. \tag{XVIII.58}$$

En particular, la amplitud y la probabilidad del estado base del átomo producto son, respectivamente,

$$c_1 = \frac{16}{27}\sqrt{2} = \left(\tfrac{8}{9}\right)^{3/2} = 0.838, \quad w_1 = \left(\tfrac{8}{9}\right)^3 = 0.70.$$

Este resultado equivale a decir que la probabilidad total de excitación, más ionización del átomo, es $1 - w_1 = 0.3$. La probabilidad de aparición de los estados excitados decrece rápidamente con la excitación, lo que permite estimar fácilmente la probabilidad de ionización:

$$w_2 = \frac{1}{4}, \quad w_3 = \frac{2^9 \cdot 3^5}{5^{10}} = 0.01\ldots, \quad \Rightarrow w_{\text{ion}} \simeq 4\,\%.$$

XVIII.9 Determine la energía mínima del estado base de un átomo helioide demandada por las desigualdades de Heisenberg.

Puesto que la determinación de la energía del estado base del átomo con dos electrones a partir de las desigualdades de Heisenberg es un procedimiento semicuantitativo, para los propósitos del presente cálculo basta considerar el hamiltoniano aproximado

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0}\left(\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \hat{\mathbf{p}}_2^2\right) - Ze^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{r_{12}}, \tag{XVIII.59}$$

donde el núcleo se considera en el origen, $\mathbf{r}_i$ es el vector de posición del i-ésimo electrón ($i = 1, 2$) y $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Tomaremos r_1 y r_2 directamente como una (sobre)estimación de la dispersión radial de los electrones, lo que asigna a la dispersión de los respectivos momentos los valores $\hbar/r_1$ y $\hbar/r_2$. Con esto la energía del sistema resulta

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2}\right) - Ze^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{r_{12}}, \tag{XVIII.60}$$

donde las diversas cantidades que intervienen deben ser consideradas como valores medios. Para continuar es necesario hacer una evaluación (simple) de la cantidad $1/r_{12}$. Para ello consideramos que r_{12} está dada esencialmente por el promedio de la máxima y la mínima separación entre los electrones, iguales respectivamente a $r_1 + r_2$ y $|r_1 - r_2|$, por lo que se puede escribir

$$r_{12} = \tfrac{1}{2}\left(r_1 + r_2 + |r_1 - r_2|\right). \tag{XVIII.61}$$

Seleccionamos las etiquetas de tal forma que $r_1 > r_2$, por lo que se cumple que $|r_1 - r_2| = r_1 - r_2$, y la expresión anterior se reduce a $r_{12} = r_1$. Con esto, la energía resulta

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2}\right) - Ze^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{r_1}, \tag{XVIII.62}$$

en donde r_1 es la mayor de las dos distancias medias.

El estado base debe corresponder cercanamente a las condiciones que hacen estacionaria esta energía respecto de las distancias medias de los electrones. Éste no es un procedimiento enteramente legítimo, pues, por tratarse de valores medios, en general se tiene que $\langle 1/r\rangle \neq \langle r\rangle^{-1}$, $\langle 1/r^2\rangle \neq \langle 1/r\rangle^2$, etc. Por ejemplo, para el caso del átomo hidrogenoide, se obtiene para los estados s (usando los resultados del problema XIII.13):

$$\langle r\rangle\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle = \tfrac{3}{2}, \quad \langle r^2\rangle\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle = 5n + \frac{1}{n}, \quad \left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle = 2n\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle^2, \tag{XVIII.63}$$

etc. Con $n = 1$ la última de estas expresiones da un factor 2 que no se considera en el cálculo sugerido arriba; este error, a pesar de ser grande, se encuentra dentro del margen semicuantitativo del resto del cálculo, por lo que procederemos sin mayor consideración. De las derivadas de la E dada por (XVIII.62) respecto de r_1 y r_2 igualadas a cero, se obtienen como valores óptimos para estas cantidades las expresiones

$$r_{1\text{mín}} = \frac{1}{Z-1}\frac{\hbar^2}{m_0e^2}, \quad r_{2\text{mín}} = \frac{1}{Z}\frac{\hbar^2}{m_0e^2}. \tag{XVIII.64}$$

La energía mínima que resulta de aquí es

$$E(Z) = -\frac{e^2}{a_0}\left(Z^2 - Z + \tfrac{1}{2}\right). \tag{XVIII.65}$$

Es interesante notar que el primer término de esta expresión coincide con la energía de dos electrones hidrogenoides; a su vez, el término de interacción entre las cargas contribuye con el factor $Z - 1/2$, que viene a ser un promedio de los términos con Z y $Z-1$ en (XVIII.62) (compárese con los resultados del problema XVIII.5).

Pese a las evidentes insuficiencias del cálculo, el resultado (XVIII.65) es razonable, como se desprende de los valores calculados para Z pequeña que se dan en la tabla adjunta, al lado de los correspondientes valores experimentales:

Z	$-E(Z)$ (eV)	$-E^{\exp}$ (eV)
2	68.0	79.0
3	176.9	198.1
4	340.1	371.6

XVIII.10 Construya funciones de onda apropiadas para la descripción de la configuración $1s2s$ de un átomo de He utilizando orbitales hidrogenoides y tomando en cuenta el espín electrónico. Demuestre que cada una de estas funciones de onda puede expresarse como una combinación lineal de determinantes de la forma

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} u_1(1) & u_1(2) \\ u_2(1) & u_2(2) \end{vmatrix},$$

donde $u_i(k)$ es un orbital de espín, es decir, el producto de un orbital espacial y una función espinorial.

Las funciones espaciales de la configuración $1s2s$ las podemos escribir en la forma sintética

$$\psi_s = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left[1s(1)2s(2) + 1s(2)2s(1)\right], \tag{XVIII.66}$$

$$\psi_a = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left[1s(1)2s(2) - 1s(2)2s(1)\right]. \tag{XVIII.67}$$

Denotando las funciones espinoriales con proyección $+1/2$ y $-1/2$ del electrón i con $\alpha(i)$, $\beta(i)$, respectivamente, las funciones espinoriales son

$$\chi_{1+} = \alpha(1)\alpha(2), \tag{XVIII.68}$$

$$\chi_{10} = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left[\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)\right], \tag{XVIII.69}$$

$$\chi_{1-} = \beta(1)\beta(2), \tag{XVIII.70}$$

$$\chi_0 = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left[\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)\right]. \tag{XVIII.71}$$

Las posibles combinaciones antisimétricas son las siguientes:

a) Singulete ${}^1S$:

$$\Psi_0 = \psi_s(1,2)\chi_0; \tag{XVIII.72}$$

b) Triplete ${}^3S$:

$$\Psi_{11} = \psi_a(1,2)\chi_{1+}, \tag{XVIII.73}$$

$$\Psi_{10} = \psi_a(1,2)\chi_{10}, \tag{XVIII.74}$$

$$\Psi_{1-1} = \psi_a(1,2)\chi_{1-}. \tag{XVIII.75}$$

Consideremos ahora, por ejemplo, la función de onda del singulete. La podemos reescribir como sigue:

$$\begin{aligned}
\Psi_0 &= \psi_s(1,2)\chi_0 \\
&= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[1s(1)2s(2)+1s(2)2s(1)\right]\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)\right] \\
&= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[1s\alpha(1)2s\beta(2)-1s\alpha(2)2s\beta(1)\right]-\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[1s\beta(1)2s\alpha(2)-1s\beta(2)2s\alpha(1)\right] \\
&= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} 1s\alpha(1) & 1s\alpha(2) \\ 2s\beta(1) & 2s\beta(2)\end{vmatrix}-\tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} 1s\beta(1) & 1s\beta(2) \\ 2s\alpha(1) & 2s\alpha(2)\end{vmatrix} \\
&= (1s\overline{2s})-(\overline{1s}2s), \qquad \text{(XVIII.76)}
\end{aligned}$$

donde la barra significa espín β ($\downarrow$), y la falta de barra, espín α ($\uparrow$). Un cálculo similar permite verificar que esta misma forma se puede dar a los estados del triplete, como se solicita demostrar. Específicamente, se obtiene:

$$\Psi_{11} = (1s2s), \qquad \text{(XVIII.77)}$$

$$\Psi_{10} = (1s\overline{2s})+(\overline{1s}2s), \qquad \text{(XVIII.78)}$$

$$\Psi_{1-1} = (\overline{1s}\,\overline{2s}). \qquad \text{(XVIII.79)}$$

Véase el ejercicio XVIII.29.

XVIII.11 Considere el siguiente modelo para el potencial de un átomo de helio en un estado excitado: Un electrón está descrito por el orbital hidrogenoide $1s$ y el otro por un orbital con $n = 2$ ($2s$, $2p$, etc.). Este electrón se considera "externo" y no apantalla al primero, para el cual se puede tomar $Z = 2$; sin embargo, el electrón $1s$ sí apantalla al segundo. Determine una $Z^*(r)$ efectiva para este electrón, suponiendo que cuando éste se encuentra a la distancia r del núcleo, "siente" el apantallamiento de toda la carga del electrón $1s$ que se encuentra distribuida dentro de la esfera de radio r.

Utilice este modelo para determinar un potencial efectivo de repulsión entre los electrones y escriba una ecuación de Schrödinger efectiva para describir el electrón excitado.

Para proceder, se requiere determinar en primer lugar la carga distribuida del electrón hidrogenoide en el estado $1s$, contenida dentro de una esfera de radio r. Por simplicidad, los cálculos se harán en unidades atómicas. Denotando la carga dentro de la esfera en cuestión como $q_{10}(r)$, se tiene

$$\begin{aligned}
q_{10}(r) &= \int_0^r R_{10}^2(r)r^2dr = 4Z^3\int_0^r r'^2e^{-2Zr'}dr' \\
&= 1-e^{-2Zr}\left(1+2Zr+2Z^2r^2\right). \qquad \text{(XVIII.80)}
\end{aligned}$$

Poniendo $Z = 2$, queda finalmente

$$q_{10}(r) = 1-e^{-4r}\left(1+4r+8r^2\right). \qquad \text{(XVIII.81)}$$

Ésta es la carga que apantalla al electrón excitado cuando se encuentra a la distancia r del núcleo; por lo tanto, la carga efectiva que "siente" este electrón es

$$Z^*(r) = Z-q_{10}(r) = 1+e^{-4r}\left(1+4r+8r^2\right). \qquad \text{(XVIII.82)}$$

A grandes distancias del núcleo, este electrón "siente" sólo una carga 1 por parte del núcleo, pero a distancias pequeñas "siente" prácticamente la acción de la carga total nuclear. El potencial efectivo de repulsión entre los electrones se puede aproximar como

$$V_{\rm ef}(r) = \frac{q_{10}(r)}{r} = \frac{-Z^*(r) + Z}{r}. \tag{XVIII.83}$$

La ecuación de Schrödinger para el electrón excitado se construye con este potencial, al que debe agregarse el de la atracción nuclear, lo que da

$$\left(-\tfrac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z}{r} + \frac{-Z^*(r) + Z}{r}\right)\psi_{nl} = E_{nl}\psi_{nl}. \tag{XVIII.84}$$

Esta ecuación juega un papel similar al de cualquiera de las ecuaciones monoelectrónicas del tipo de la ecuación (T17.32), obtenidas con métodos como el de Hartree-Fock. El potencial resultante, $-Z^*(r)/r$, se aproxima a $-2/r$ cerca del núcleo (apantallamiento nulo), pero se reduce a $-1/r$ lejos de él (apantallamiento total de un electrón).

* **XVIII.12** Utilice el método variacional para calcular la energía del estado base del litio, tomando en cuenta el espín del electrón.

Debido a la longitud del cálculo requerido, sólo se presentará en forma resumida, dejando al lector completar los detalles. En su estado base, el espín electrónico total del litio es $1/2$, pues hay dos electrones en el estado orbital $|100\rangle$ con espines antiparalelos, y un tercer electrón en el estado orbital $|200\rangle$. Para aplicar el método variacional se tomarán funciones hidrogenoides con parámetros libres, que se determinarán demandando que la energía sea estacionaria. En particular, se introducirán cargas nucleares efectivas Z_1 y Z_2 en las funciones de onda, para tomar en cuenta el efecto de blindaje parcial de la carga nuclear por los electrones; estas cargas nucleares efectivas constituirán los parámetros variacionales.

En unidades atómicas las funciones radiales de prueba son

$$\psi_{100} = 2Z_1^{3/2}e^{-Z_1 r}, \tag{XVIII.85}$$

$$\psi_{200} = AZ_2^{3/2}e^{-Z_2 r/2}\left(1 - cZ_2 r\right). \tag{XVIII.86}$$

La constante c se fija de manera que garantice la ortogonalidad entre ψ_{100} y ψ_{200}, mientras que A se usa para normalizar ψ_{200}. Para mayor simplicidad se escribirá

$$\alpha = Z_1, \quad \beta \equiv \lambda\alpha = Z_2/2, \quad a = 2Z_1^{3/2}, \quad b = AZ_2^{3/2}. \tag{XVIII.87}$$

De la ortogonalización y normalización de ψ_{200} se obtiene

$$cZ_2 = \tfrac{1}{3}(\alpha + \beta), \quad b^2 = A^2Z_2^3 = \frac{12\beta^5}{\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2}. \tag{XVIII.88}$$

Las funciones radiales de prueba quedan

$$\psi_1 \equiv \psi_{100} = ae^{-\alpha r}, \quad \psi_2 \equiv \psi_{200} = b\left[1 - \tfrac{1}{3}(\alpha + \beta)r\right]e^{-\beta r}. \tag{XVIII.89}$$

Consideraremos el caso $S_3 = 1/2$; escogiendo las funciones espinoriales electrónicas como

$$\chi_+(+\tfrac{1}{2}) = \chi_-(-\tfrac{1}{2}) = 1, \quad \chi_+(-\tfrac{1}{2}) = \chi_-(+\tfrac{1}{2}) = 0, \tag{XVIII.90}$$

y escribiendo $\sigma_i = S_{3i}$, donde $i = 1, 2, 3$ enumera los electrones, el determinante de Slater que genera la función de onda antisimétrica se puede escribir en la forma

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1)\chi_+(\sigma_1) & \psi_1(2)\chi_+(\sigma_2) & \psi_1(3)\chi_+(\sigma_3) \\ \psi_1(1)\chi_-(\sigma_1) & \psi_1(2)\chi_-(\sigma_2) & \psi_1(3)\chi_-(\sigma_3) \\ \psi_2(1)\chi_+(\sigma_1) & \psi_2(2)\chi_+(\sigma_2) & \psi_2(3)\chi_+(\sigma_3) \end{vmatrix}. \qquad \text{(XVIII.91)}$$

Con esta función de onda debemos calcular el valor esperado del hamiltoniano del litio. Despreciando los efectos del movimiento del núcleo (como se hizo al tratar la ecuación (T18.1) del texto), este hamiltoniano lo podemos escribir como

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{3} \left(-\tfrac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{23}} + \frac{1}{r_{31}}. \qquad \text{(XVIII.92)}$$

Las diversas contribuciones resultan como sigue:
Energía cinética de un electrón en el estado $1s$:

$$T_1 = \langle 1| -\tfrac{1}{2}\nabla^2 |1\rangle = \int_0^\infty \left(\frac{d\psi_1}{dr} \right)^2 r^2 dr = \frac{\alpha^2}{2}. \qquad \text{(XVIII.93)}$$

Energía cinética de un electrón en el estado $2s$:

$$T_2 = \frac{\beta^2}{6} + \frac{\beta^4}{\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2}. \qquad \text{(XVIII.94)}$$

Energía potencial de un electrón $1s$ con el núcleo:

$$U_1 = \langle 1| -\frac{Z}{r_i} |1\rangle = -Z \int_0^\infty \psi_1^2 r dr = -Z\alpha. \qquad \text{(XVIII.95)}$$

Energía potencial de un electrón $2s$ con el núcleo:

$$U_2 = -\frac{Z\beta}{2} \left(1 - \frac{\beta(\alpha - 2\beta)}{\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2} \right). \qquad \text{(XVIII.96)}$$

Energía de interacción entre los dos electrones $1s$:

$$J_{11} = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{1}{r_{12}} \psi_1^2(r_1)\psi_1^2(r_2) r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 = \frac{5\alpha}{8}. \qquad \text{(XVIII.97)}$$

Energía de interacción entre un electrón $1s$ y el electrón $2s$:

$$\begin{aligned} J_{12} &= \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{1}{r_{12}} \psi_1^2(r_1)\psi_2^2(r_2) r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \\ &= \alpha - \frac{\alpha^3}{(\alpha+\beta)^2} \left[1 + \frac{\alpha\beta(3\alpha+\beta)}{2(\alpha+\beta)(\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2)} \right]. \end{aligned} \qquad \text{(XVIII.98)}$$

Energía de intercambio entre los dos electrones con espines paralelos:

$$\begin{aligned} K &= \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{1}{r_{12}} r_1^2 \psi_1(r_1)\psi_1(r_2)\psi_2(r_1)\psi_2(r_2) dr_1 r_2^2 dr_2 \\ &= \frac{4\alpha^3\beta^5}{(\alpha+\beta)^5(\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2)}. \end{aligned} \qquad \text{(XVIII.99)}$$

La energía cinética total es, con $\beta = \lambda\alpha$,

$$T = 2T_1 + T_2 \equiv \alpha^2 F_1(\lambda), \tag{XVIII.100}$$

y la energía potencial, a su vez, resulta

$$U = 2U_1 + U_2 + J_{11} + 2J_{12} - K \equiv -\alpha F_2(\lambda). \tag{XVIII.101}$$

El mínimo de la energía $E = T + U$ se obtiene minimizando simultáneamente respecto de α y λ, lo que da la pareja de condiciones (para $\alpha \neq 0$)

$$2\alpha F_1(\lambda) - F_2(\lambda) = 0, \quad \alpha F_1'(\lambda) - F_2'(\lambda) = 0. \tag{XVIII.102}$$

Por eliminación de α se obtiene la ecuación para λ

$$F_1' F_2 - 2F_1 F_2' = 0, \tag{XVIII.103}$$

que se puede resolver numéricamente. Se obtiene $\alpha_{\text{mín}} = F_2/2F_1$. Los resultados son[2]

$$\alpha_{\text{mín}} = 2.694, \quad \beta_{\text{mín}} = 0.767. \tag{XVIII.104}$$

El valor (mínimo) de la energía que corresponde a esta solución es

$$E_1^{\text{var}} = -7.414 \text{ ua } = -200.8 \text{ eV}. \tag{XVIII.105}$$

El valor experimental es $E_1^{\text{exp}} = -202.54$ eV, lo que representa un error en el cálculo menor del 1 %. Los valores obtenidos para Z_1, Z_2 son

$$Z_1 = \alpha = 2.69, \quad Z_2 = 2\beta = 1.53. \tag{XVIII.106}$$

Comparando estos resultados con 3 (la carga real del núcleo) se observa que los electrones internos $1s$ "sienten" prácticamente toda la carga, mientras que para el externo $2s$ la mitad de la carga resulta blindada por los dos electrones internos.[3]

XVIII.13 Determine la configuración electrónica de los elementos de las tierras raras ($Z = 57$ a 70) y explique la similitud de sus propiedades.

La configuración electrónica de las tierras raras se puede determinar simplemente a partir de la del xenón, que posee $Z = 54$ electrones y es el gas noble que precede a estos elementos. La configuración electrónica del Xe es

$$[\text{Xe}] = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6.$$

Para alcanzar el valor $Z = 57$ de la primera tierra rara es necesario añadir tres electrones al Xe. Las subcapas inmediatas disponibles son la $6s$, en la cual es posible acomodar dos electrones, y la $4f$, que acepta 14. Las 14 tierras raras llenan la capa $6s$ y van llenando paso a paso la capa $4f$, como se muestra en el cuadro XVIII.2.

La similitud entre las propiedades químicas de estos elementos es resultado de que todos van llenando la misma subcapa. Sin embargo, esto no basta, pues, por ejemplo, también los elementos B, C, N, F y Ne van llenando una misma subcapa

[2] Goldman y Krivchenkov (1957), capítulo 7. Véanse también: E. Clementi, *J. Phys.*, **38** (1963) 996; R. E. Knight, *Phys. Rev.* **183** (1968) 45.

[3] Veánse los problemas XVIII.14 y XVIII.15.

Z	**Elemento**	**Configuración**
57	La	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^1$
58	Ce	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^2$
59	Pr	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^3$
60	Nd	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^4$
61	Pm	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^5$
62	Sm	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^6$
63	Eu	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^7$
64	Gd	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^8$
65	Tb	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^9$
66	Dy	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^{10}$
67	Ho	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^{11}$
68	Er	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^{12}$
69	Tm	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^{13}$
70	Yb	$[\mathrm{Xe}]\, 6s^2 4f^{14}$

Cuadro XVIII.2: Configuración electrónica de las tierras raras.

$2p$ y no por eso poseen un comportamiento químico común. Lo específico de las tierras raras es que la subcapa $4f$ es "circular" y más "interna" que la $6s$, pues corresponde a $n = 4$ y $l = n - 1$, con radio medio igual a 16 a_0, mientras que para la subcapa $6s$ se tiene $n = 6$ y $l = 1$, y le corresponde un radio medio mucho mayor, $\langle r \rangle = 53.5\ a$ (cf. los problemas I.13 y XIII.12). Así pues, después de que los dos primeros electrones se usan para llenar la subcapa $6s$ externa, los siguientes electrones se acomodan en una subcapa muy interior. En cierto sentido, puede decirse que los electrones de la subcapa $4f$ pertenecen a las capas interiores del átomo. Como las propiedades químicas de los elementos dependen de los electrones más externos, y éstos son dos electrones de valencia en la capa $6s$ para todas las tierras raras, todas ellas tienen propiedades químicas comunes.

* **XVIII.14** Investigue las reglas de Slater para la determinación de la carga nuclear efectiva que "siente" un electrón atómico y utilícelas para calcular la carga nuclear efectiva que "siente" un electrón de valencia del neón ($Z = 10$).

Considere un electrón atómico a la distancia r del núcleo, de carga Ze_0. Los electrones distribuidos en el interior de esta esfera producen un blindaje parcial entre el electrón y el núcleo, lo que reduce el valor efectivo de Z (efecto conocido como *blindaje interno*); además, se encuentra que los electrones más externos reducen aún más el valor efectivo de Z (efecto de bindaje externo). Desde l930 J. C. Slater propuso representar estos efectos considerando que sobre el electrón atómico i actúa, además del potencial atractivo común nuclear Z/r, un potencial repulsivo producido por el resto de electrones de valor σ_i/r, en donde la *constante (de) pantalla* σ_i deberá ser determinada en cada caso (por ejemplo, con el método

variacional). Introduciendo la *carga nuclear efectiva del electrón* Z_i^*, es decir, la carga nuclear que efectivamente siente el electrón atómico i, definida como

$$Z_i^* = Z - \sigma_i \tag{XVIII.107}$$

el hamiltoniano de un átomo multielectrónico se puede aproximar en la forma (seguimos usando unidades atómicas)

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2}\nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{n} \frac{Z_i^*}{r_i} \tag{XVIII.108}$$

(compare con los resultados del problema XVIII.11, particularmente con la ecuación (XVIII.84)).

Slater completó su propuesta con la formulación de una serie de reglas empíricas para determinar aproximadamente el valor de las σ_i de un átomo. Estas *reglas de Slater* son las siguientes.

a) La configuración electrónica en cuestión se reescribe agrupando los estados s y p como sigue:

$$(1s)\,(2s2p)\,(3s3p)\,(3d)\,(4s4p)\,(4d)\,(4f)\,(5s5p)\cdots$$

b) Se identifica al grupo del i-ésimo electrón. La correspondiente σ_i se obtiene como la suma de las siguientes contribuciones:

   i) 0 por cada electrón a la derecha.

   ii) 0.35 por cada electrón adicional en el mismo grupo al que pertenece el electrón i-ésimo, excepto para el orbital $1s$, para el que debe agregarse sólo 0.30.

   iii) Si i es un electrón s o p: 0.85 por cada electrón en los grupos con $n = n_i - 1$, 1 por todos los electrones más a la izquierda.

   iv) Si i es un electrón d o f: 1 por cada electrón a la izquierda del grupo al que pertenece i.

La diferencia entre Z y Z^* puede ser muy significativa; por ejemplo, para el electrón de valencia del litio ($Z = 3$) resulta $Z^* = 1.3$, etc. Los ejemplos que siguen corroboran esta observación.

Para aplicar las reglas de Slater al Ne, cuya configuración electrónica es

$$[\mathrm{Ne}] = 1s^2 2s^2 2p^6,$$

partimos de la correspondiente configuración de Slater $(1s)^2(2s2p)^8$. Un electrón de valencia en este elemento tiene el número cuántico principal $n = 2$, y las reglas de Slater dan para él

$$\sigma_i = 0.35 \times 7 + 0.85 \times 2 = 4.15. \tag{XVIII.109}$$

De aquí que la carga nuclear efectiva de los electrones de valencia del neón resulte

$$Z^* = 10 - 4.15 = 5.85. \tag{XVIII.110}$$

XVIII.15 Compare la carga nuclear efectiva de un electrón $3d$ y un electrón $4s$ del hierro.

La configuración electrónica del hierro ($Z = 26$) es

$$[\text{Fe}] = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$$

y su configuración de Slater resulta

$$[\text{Fe}] = (1s)^2 (2s2p)^8 (3s3p)^8 (3d)^6 (4s4p)^2 . \tag{XVIII.111}$$

Aplicando las reglas de Slater se obtiene para un electrón $3d$

$$\sigma_{3d} = 0 \times 2 + 0.35 \times 5 + 1.0 \times 18 = 19.75, \tag{XVIII.112}$$

y para su carga nuclear efectiva

$$Z^*_{3d} = Z - \sigma_{3d} = 26 - 19.75 = 6.25. \tag{XVIII.113}$$

Para un electrón $4s$ resulta

$$\sigma_{4s} = 0.35 \times 1 + 0.85 \times 14 + 1.0 \times 10 = 22.25 \tag{XVIII.114}$$

y

$$Z^*_{4s} = Z - \sigma_{4s} = 3.75. \tag{XVIII.115}$$

Estos resultados muestran que debe esperarse que, en promedio, los electrones en los orbitales $3d$ del hierro estén más cerca del núcleo (estén más localizados) que los electrones $4s$.

XVIII.3. Ejercicios

XVIII.16 Siguiendo la teoría expuesta en la sección 18.1 del texto, identifique:

a) Cinco especies isoelectrónicas con el Xe.

b) La configuración del gas noble que sigue al radón.

c) ¿A qué familia pertenecería el primer elemento que llenara la subcapa $5g$?

XVIII.17 Demuestre que el estado base del Cr^{24}, $^7S_3$, cumple con el principio de exclusión de Pauli.

XVIII.18 ¿Cuáles son los posibles valores del momento angular total en los estados ^1S, ^3S, ^3P, ^2D, ^4D? ¿Cuáles estados o términos pueden realizarse para dos electrones en los estados a) ns, $n's$, y b) np, $n'p$?

XVIII.19 Verifique la ecuación (XVIII.33) para el átomo de hidrógeno.

XVIII.20 Verifique que la expresión dada en la ecuación (XVIII.37) representa la energía potencial de un electrón en interacción con $Z - 1$ electrones, cuya carga se considera uniformemente distribuida dentro de una esfera de radio R.

XVIII.21 Determine el valor más probable de r para el átomo de hidrógeno en su estado base.

XVIII.22 Determine la distribución del momento lineal del electrón de un átomo de hidrógeno.

XVIII.23 En el texto se utiliza el método variacional para encontrar la energía del estado base del helio utilizando la función de prueba

$$\psi = \frac{1}{\pi a^3} \exp\left(-\frac{r_1 + r_2}{a}\right),$$

con a el parámetro variacional. Trate de modificar esta función de prueba para que el error en la energía del estado base no exceda $0.5\,\%$ del valor experimental.

XVIII.24 Utilice la función de onda (T18.20) del átomo de helio para determinar el campo electrostático producido por dicho átomo en el espacio que lo rodea.

XVIII.25 Resuelva la ecuación radial de Schrödinger para el átomo hidrogenoide en términos de funciones hipergeométricas y verifique que para los estados s se satisface la ecuación (XVIII.50). Utilice este resultado para derivar la ecuación (XVIII.51).

XVIII.26 Escriba una función determinante que corresponda al estado base del átomo de nitrógeno.

XVIII.27 Demuestre que la velocidad media de los electrones atómicos predicha por el modelo de Thomas-Fermi es proporcional a $Z^{2/3}$.

XVIII.28 Las energías de las transiciones entre tres niveles rotacionales sucesivos en una molécula diatómica son 10^{-4} eV (entre el inferior y el central) y 2×10^{-4} eV (entre el central y el superior). Determine los valores del momento angular l y el momento de inercia de la molécula.

XVIII.29 Proceda como en el problema XVIII.10 para construir las funciones de onda de los estados ^{1}P y ^{3}P de la configuración $1s2p$ del He.

XVIII.30 Separe las variables de la ecuación de Schrödinger para el ion H_2^+ utilizando coordenadas elípticas.

XIX. Moléculas

XIX.1. Problemas del texto

XIX.1 Calcule con detalle la función $S(R)$ que aparece en la ecuación (T19.12), siguiendo el procedimiento sugerido en el texto.

Como se discute en el texto, una manera simple, pero efectiva, de hacer algunos cálculos variacionales elementales concernientes al ion H_2^+ consiste en describir el electrón orbital compartido como si parte del tiempo se encontrara en el estado hidrogenoide $\psi_A(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ alrededor de uno de los núcleos (colocado en la posición A) y el resto del tiempo en un estado similar, pero alrededor del otro núcleo (éste en la posición B) con función de onda $\psi_B(\mathbf{r}, \mathbf{R})$. En esta descripción simplificada de la molécula ionizada, la función de onda del electrón, tomando en cuenta el factor espinorial, puede tomar en principio una de las dos formas

$$\Psi_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{R})\, \chi, \tag{XIX.1}$$

donde

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = N_{\pm}\left[\psi_A(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \pm \psi_B(\mathbf{r}, \mathbf{R})\right]. \tag{XIX.2}$$

Como se demuestra en el texto, sucede que en la realidad sólo el orbital molecular simétrico conduce a un estado molecular ligado. Sin embargo, esto último es irrelevante para el presente cálculo, pues se trata simplemente de determinar el traslape (o solape) de las funciones de onda de un electrón, referidas a los núcleos A y B, que está dado por

$$S(R) = \langle \psi_A(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \mid \psi_B(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \rangle \equiv \langle A \mid B \rangle, \tag{XIX.3}$$

donde como funciones de prueba se deben usar estados hidrogenoides, es decir,

$$\psi_A(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-r/a_0}, \tag{XIX.4}$$

$$\psi_B(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-|\mathbf{R}+\mathbf{r}|/a_0}. \tag{XIX.5}$$

$\mathbf{R}$ es el vector que une los núcleos, y $\mathbf{r}$ el que une el electrón con el núcleo A, cuya posición se ha tomado como origen de coordenadas. Substituyendo las funciones de prueba en la expresión (XIX.3) se obtiene

$$S(R) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right) \int \exp\left(-\frac{|\mathbf{R}+\mathbf{r}|}{a_0} - \frac{r}{a_0}\right)\, d^3r, \tag{XIX.6}$$

Para realizar la integración partimos de la fórmula derivada en la sección 4.6 del texto,[1]

$$\frac{e^{-ikr}}{r} = \frac{1}{2\pi^2}\int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{q^2-k^2}\,d^3q. \tag{XIX.7}$$

Haciendo el cambio de variable $ik \to k$ se obtiene una nueva fórmula integral

$$\frac{e^{-kr}}{r} = \frac{1}{2\pi^2}\int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{q^2+k^2}\,d^3q. \tag{XIX.8}$$

La derivada de esta expresión respecto de k conduce a otra fórmula integral muy útil:

$$e^{-kr} = \frac{1}{\pi^2}\int \frac{ke^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{\left(q^2+k^2\right)^2}\,d^3q. \tag{XIX.9}$$

Substituyendo estas expresiones en (XIX.6) queda, con $k = 1/a_0$,

$$S\left(R\right) = \frac{1}{\left(\pi a_0\right)^5}\int\int\int \frac{e^{i\mathbf{r}\cdot\left(\mathbf{q}'+\mathbf{q}\right)}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}}{\left(q^2+a_0^{-2}\right)^2\left(q'^2+a_0^{-2}\right)^2}d^3r\;d^3q\;d^3q'\;.$$

La integral sobre $\mathbf{r}$ se realiza de inmediato usando la fórmula

$$\frac{1}{\left(2\pi\right)^3}\int e^{i\mathbf{r}\cdot\left(\mathbf{q}'+\mathbf{q}\right)}\,d^3r = \delta\left(\mathbf{q}'+\mathbf{q}\right), \tag{XIX.10}$$

con el resultado

$$\begin{aligned} S(R) &= \frac{8}{\pi^2 a_0^5}\int\int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}\delta\left(\mathbf{q}'+\mathbf{q}\right)}{\left(q^2+a_0^{-2}\right)^2\left(q'^2+a_0^{-2}\right)^2}\;d^3q\;d^3q' \\ &= \frac{8}{\pi^2 a_0^5}\int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}}{\left(q^2+a_0^{-2}\right)^4}\,d^3q. \end{aligned} \tag{XIX.11}$$

Para evaluar la integral podemos utilizar la técnica de residuos de la teoría de variable compleja; sin embargo, es más simple observar que la triple derivada de (XIX.8) con respecto a k^2 da

$$\begin{aligned} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{\left(q^2+k^2\right)^4}\,d^3q &= -\frac{\pi^2}{3}\frac{d^3}{\left(dk^2\right)^3}\frac{e^{-kr}}{r} \\ &= \frac{\pi^2}{8k^5}\left(1+rk+\frac{1}{3}r^2k^2\right)e^{-kr}. \end{aligned} \tag{XIX.12}$$

Sustituyendo este resultado en (XIX.11) se obtiene

$$S(R) = \left(1+\frac{R}{a_0}+\tfrac{1}{3}\frac{R^2}{a_0^2}\right)e^{-R/a_0}, \tag{XIX.13}$$

que es la ecuación (T19.17) que se quería demostrar.

[1] Un método de evaluación más eficiente de las integrales involucradas es el empleado en el problema XIX.12.

XIX.2 Realice los cálculos intermedios para obtener la ecuación (T19.20).

La ecuación referida da la energía del ion H_2^+, obtenida a partir de la ecuación (T19.19)

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{1}{1 \pm S} \left(\left\langle A \mid \hat{H} \mid A \right\rangle \pm \left\langle A \mid \hat{H} \mid B \right\rangle \right), \tag{XIX.14}$$

donde se está empleando la misma notación que en el problema anterior. Denotando con E_1 la energía del estado base del átomo de hidrógeno, se tiene

$$\begin{aligned} \left\langle A \mid \hat{H} \mid A \right\rangle &= \langle A| \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}|} \right) |A\rangle \\ &= E_1 + \frac{e^2}{R} - e^2 \langle A| \frac{1}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}|} |A\rangle . \end{aligned} \tag{XIX.15}$$

De la ecuación (XIX.8) sigue que

$$\frac{1}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}|} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{r})}}{q^2} \, d^3q; \tag{XIX.16}$$

tomando el valor esperado con la función de prueba (XIX.4) queda

$$\langle A| \frac{1}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}|} |A\rangle = \frac{1}{2\pi^3 a_0^3} \int\int \frac{e^{-2r/a_0} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{r})}}{q^2} \, d^3q \, d^3r. \tag{XIX.17}$$

Usando una vez más (XIX.9) puede darse a esta expresión la forma

$$\begin{aligned} \langle A| \frac{1}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}|} |A\rangle &= \frac{1}{\pi^5 a_0^4} \int\int\int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} e^{i\mathbf{r}\cdot(\mathbf{q}+\mathbf{q}')}}{q^2 \left(q'^2 + 4/a_0^2\right)^2} d^3q' d^3q \, d^3r. \\ &= \frac{8}{\pi^2 a_0^4} \int\int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \delta(\mathbf{q}+\mathbf{q}')}{q^2 \left(q'^2 + 4/a_0^2\right)^2} d^3q' d^3q. \\ &= \frac{8}{\pi^2 a_0^4} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}}{q^2 \left(q^2 + 4/a_0^2\right)^2} d^3q. \end{aligned} \tag{XIX.18}$$

Para realizar esta integración de la manera simple se desarrolla el denominador en fracciones parciales y se usa la ecuación (XIX.8) y su derivada respecto de k^2; así se obtiene

$$\begin{aligned} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}}{q^2 \left(q^2 + 4/a_0^2\right)^2} d^3q &= \frac{a_0^4}{16} \int \left[\frac{1}{q^2} - \frac{1}{q^2 + 4/a_0^2} - \frac{4/a_0^2}{\left(q^2 + 4/a_0^2\right)^2} \right] e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} d^3q \\ &= \frac{\pi^2 a_0^4}{8} \left[\frac{1}{R} - \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{a_0} \right) e^{-2R/a_0} \right]. \end{aligned} \tag{XIX.19}$$

De aquí sigue

$$\left\langle A \mid \hat{H} \mid A \right\rangle = E_1 + \frac{e^2}{R} \left(1 + \frac{R}{a_0} \right) e^{-2R/a_0}. \tag{XIX.20}$$

De forma análoga se procede con la contribución

$$\begin{aligned} \left\langle A \mid \hat{H} \mid B \right\rangle &= \langle A| \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}|} \right) |B\rangle \\ &= \left(E_1 + \frac{e^2}{R} \right) S - e^2 \langle A| \frac{1}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}|} |B\rangle , \end{aligned} \tag{XIX.21}$$

que contiene la integral

$$\langle A| \frac{1}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}|} |B\rangle = \frac{4}{\pi^2 a_0^4} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}}{\left(q^2 + a_0^{-2}\right)^3} d^3q. \tag{XIX.22}$$

El resultado es

$$\left\langle A \mid \hat{H} \mid B \right\rangle = \left(E_1 + \frac{e^2}{R}\right) S - \frac{e^2}{a_0}\left(1 + \frac{R}{a_0}\right) e^{-R/a_0}. \tag{XIX.23}$$

Sustituyendo los resultados anteriores en (XIX.14) y poniendo $x = R/a_0$, se obtiene para el valor esperado de la energía

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{H} \right\rangle &= \frac{1}{1 \pm S}\left\{ E_1 (1 \pm S) + \frac{e^2}{R}\left(1 + \frac{R}{a_0}\right)\left[e^{-2R/a_0} \mp \frac{R}{a_0} e^{-R/a_0}\right] \pm \left(\frac{e^2}{R}\right) S \right\} \\ &= E_1 + \frac{e^2}{R} \frac{(1+x)\, e^{-2x} \pm \left(1 - 2x^2/3\right) e^{-x}}{1 \pm S}, \end{aligned} \tag{XIX.24}$$

donde S está dado por la ecuación (XIX.13),

$$S(x) = \left(1 + x + \tfrac{1}{3}x^2\right) e^{-x}. \tag{XIX.25}$$

XIX.3 Derive el valor esperado de $\hat{H}$ dado por la ecuación (T19.23) y muestre que tiene el comportamiento discutido en el texto.

Se trata de describir semicuantitativamente el comportamiento del estado base de la molécula de hidrógeno, usando para ello la función de onda más simple posible,

$$\psi_1 = \psi_+(1)\, \psi_+(2)\, \chi_0, \tag{XIX.26}$$

donde los orbitales moleculares se construyen con estados hidrogenoides y se toman como

$$\psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm S)}} (\psi_A \pm \psi_B), \tag{XIX.27}$$

y χ_0 es la función de onda espinorial que corresponde al singulete con espín total nulo. El hamiltoniano de la molécula se va a aproximar como

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} - \frac{e^2}{r_{2B}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R}. \tag{XIX.28}$$

Con estas aproximaciones el valor esperado de la energía resulta

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{H} \right\rangle &= \left\langle \psi_1 \mid \hat{H} \mid \psi_1 \right\rangle = \left\langle \psi_+(1)\psi_+(2) \mid \hat{H} \mid \psi_+(1)\psi_+(2) \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_+(1)\psi_+(2) \mid \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{R} \mid \psi_+(1)\psi_+(2) \right\rangle, \end{aligned} \tag{XIX.29}$$

donde se han introducido los hamiltonianos parciales correspondientes a un ion de la molécula de hidrógeno,

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{1B}} + \frac{e^2}{R}, \tag{XIX.30}$$

$$\hat{H}_2 = \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{2A}} - \frac{e^2}{r_{2B}} + \frac{e^2}{R}. \tag{XIX.31}$$

Desarrollando, resulta

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \left\langle \psi_+(1) \mid \hat{H}_1 \mid \psi_+(1) \right\rangle + \left\langle \psi_+(2) \mid \hat{H}_2 \mid \psi_+(2) \right\rangle + \left\langle \psi_+(1)\psi_+(2) \mid \frac{e^2}{r_{12}} \mid \psi_+(1)\psi_+(2) \right\rangle - \frac{e^2}{R}. \qquad \text{(XIX.32)}$$

Las dos primeras contribuciones dan la energía de sendos iones de hidrógeno. Con esta identificación, la energía de la molécula se puede escribir en la forma

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = 2E_{H^+} + \langle \psi_1 | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi_1 \rangle - \frac{e^2}{R}. \qquad \text{(XIX.33)}$$

El comportamiento cualitativo de esta expresión, tomada como función de la distancia internuclear R, no puede diferir mucho del dado por el primer término, aunque la corrección debida a la interacción entre los electrones tiende a debilitar la ligadura. En todo caso, esta corrección no puede tener efectos mucho más allá de los que tiene su equivalente en el caso de un átomo heliode, y su acción aparece favorablemente compensada por el último término. Luego es de esperarse que la teoría prediga correctamente la estabilidad de la molécula de hidrógeno; es claro que sólo un cálculo detallado permitiría alcanzar una conclusión más firme (lo que, en efecto, sucede).

XIX.4 A grandes distancias, el potencial de enlace de la molécula H_2 decrece exponencialmente (cf. ecuación (T19.20)), mientras que las fuerzas de van der Waals decrecen como R^{-7} (cf. ecuación (T17.24)). ¿Cuál es la razón de esta aparente disparidad?

Tal aparente disparidad en realidad no existe, puesto que se está hablando de cosas diferentes. Cuando dos moléculas neutras se encuentran muy cerca, de tal forma que sus nubes electrónicas se traslapan, aparecen fuerzas electrostáticas entre ellas. Ejemplo de este fenómeno es el término de interacción entre los electrones que aparece en el hamiltoniano (XIX.28) del problema anterior. Es claro que estas fuerzas pueden ser atractivas o repulsivas, y que deben decrecer muy rápidamente con la distancia, pues al aumentar ésta se pierde el traslape y, como se demostró, por ejemplo, en el problema ilustrativo 13.1 del texto, átomos neutros producen en su exterior campos electrostáticos promedio que decaen exponencialmente con la distancia (pues la propia función de onda decrece exponencialmente en esa zona).

Por su lado, las fuerzas de van der Waals se deben al acoplamiento entre los multipolos instantáneos de las moléculas neutras cuando éstas están separadas grandes distancias (como se explica en la sección 17.2 del texto). En este caso la energía potencial de interacción decrece con la distancia como corresponde al producto de los multipolos que se acoplan, lo que típicamente da una potencia de la distancia. Por ejemplo, para el caso del acoplamiento entre dipolos eléctricos se obtiene la dependencia $\sim (R^{-3})^2 = R^{-6}$ para el potencial promedio; la correspondiente fuerza de van der Waals decrece como R^{-7}.

XIX.5 Utilizando las relaciones (T19.39) y haciendo suposiciones razonables, determine el orden de magnitud del desplazamiento nuclear durante el tiempo que dura una transición electrónica y muestre que la conclusión legitima el principio de Franck y Condon.

Denotemos con R_0 la posición de equilibrio del núcleo y con b la amplitud del movimiento vibracional nuclear alrededor de R_0, que se supone es de frecuencia ω_0. Modelando estas vibraciones con un oscilador armónico, la energía resulta del orden $\sim \hbar\omega_{0,}$ por lo que con ayuda de las ecuaciones (T19.39) podemos escribir

$$E_{\text{vib}} \sim \hbar\omega_0 \sim \sqrt{\frac{m}{M}}\,|E_{\text{elect}}| \sim \sqrt{\frac{m}{M}}\frac{\hbar^2}{ma^2} \sim \sqrt{\frac{m}{M}}\frac{\hbar^2}{mR_0^2}, \tag{XIX.34}$$

con a la dimensión característica de la molécula, la cual es del mismo orden de magnitud que la separación de equilibrio entre los núcleos, R_0. E_{elect} es la energía electrónica de la molécula. Como la energía potencial asociada a un desplazamiento del núcleo de masa M sobre una distancia b, que es del orden $\sim M\omega_0^2 b^2$, es comparable con la del oscilador, se cumple que

$$M\omega_0^2 b^2 \sim \hbar\omega_0. \tag{XIX.35}$$

Combinando estas dos últimas expresiones se obtiene

$$b^2 \sim \frac{\hbar}{M\omega_0} = \frac{\hbar^2}{M\hbar\omega_0} \sim \sqrt{\frac{m}{M}}a^2, \tag{XIX.36}$$

o sea

$$b \sim \left(\frac{m}{M}\right)^{1/4} a \sim \left(\frac{m}{M}\right)^{1/4} R_0. \tag{XIX.37}$$

Vemos que la razón de la amplitud vibracional b del núcleo respecto a la distancia de equilibrio R_0 es del orden $(m/M)^{1/4} \ll 1$. Esto da soporte a la hipótesis de que durante el tiempo que se realiza la transición electrónica, los núcleos permanecen prácticamente inmóviles, que es el principio de Franck y Condon.

XIX.6 Para calcular la energía de una molécula diatómica se usó en el texto la aproximación de oscilador armónico (ecuación (T19.30)). Esta aproximación es satisfactoria sólo para valores no muy grandes de los números cuánticos vibracional K y rotacional L. Determine las correcciones a la ecuación (T19.35) en caso de que se tomen en cuenta los términos de tercero y cuarto orden en el desarrollo de $\mathcal{E}(R)$ dado por la ecuación (T19.30). Compruebe que ambas correcciones son del mismo orden de magnitud y determine cuándo son importantes.

La ecuación de Schrödinger para el movimiento nuclear es la (T19.28),

$$\hat{T}_R\varphi_n + \mathcal{E}_n(R)\varphi_n = E\varphi_n, \tag{XIX.38}$$

donde $\hat{T}_R$ es el operador de energía cinética de los núcleos y $\mathcal{E}_n(R)$ —que juega el papel de potencial para el movimiento nuclear— es la energía electrónica. Desarrollando $\mathcal{E}_n(R)$ hasta términos de cuarto orden inclusive se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\varphi + \left[-D + \tfrac{1}{2}M\omega_0^2\,(R-R_0)^2 + b\,(R-R_0)^3 + c\,(R-R_0)^4\right]\varphi = E\varphi, \tag{XIX.39}$$

donde se ha puesto (véase el siguiente problema)

$$b = -\frac{M\omega_0^2}{2a}, \quad c = \frac{7M\omega_0^2}{24a^2}. \tag{XIX.40}$$

Como este potencial es central, podemos separar de inmediato la ecuación para la función radial $u(R) = R\varphi(R)$ y escribir

$$Eu = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2u}{dR^2} + \left[\frac{\hbar^2 L(L+1)}{2MR^2} - D + \tfrac{1}{2}M\omega_0^2(R-R_0)^2 + b(R-R_0)^3 + c(R-R_0)^4\right]u. \quad \text{(XIX.41)}$$

Haciendo el cambio de variable $r = R - R_0$ y aproximando $R^{-2} \simeq R_0^{-2}$ en el término centrífugo, la ecuación anterior toma la forma

$$Eu = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2u}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2 L\,(L+1)}{2MR_0^2} - D + \tfrac{1}{2}M\omega_0^2 r^2 + br^3 + cr^4\right)u. \quad \text{(XIX.42)}$$

Introduciendo la definición

$$E' = E + D - \frac{\hbar^2 L\,(L+1)}{2MR_0^2} \quad \text{(XIX.43)}$$

esta ecuación se transforma en

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dr^2} + \tfrac{1}{2}M\omega_0^2 r^2 + br^3 + cr^4\right)u = E'u, \quad \text{(XIX.44)}$$

que es una ecuación de Schrödinger para un oscilador armónico perturbado por el potencial

$$H' = br^3 + cr^4. \quad \text{(XIX.45)}$$

Un análisis comparativo de las contribuciones de $\hat{H}_0$ y $\hat{H}'$ a la energía muestra que es legítimo tratar $\hat{H}'$ como una perturbación. El oscilador con esta perturbación se estudia en el problema XIV.1, donde se demuestra que el término cr^4 da la corrección de primer orden

$$E''_K = \frac{3\hbar^2 c}{2M^2\omega_0^2}\left(K^2 + K + \tfrac{1}{2}\right), \quad K = 0, 1, 2, \ldots, \quad \text{(XIX.46)}$$

mientras que la corrección debida al término br^3 es de segundo orden y vale

$$E'_K = -\frac{30\hbar^2 b^2}{8M^3\omega_0^4}\left(K^2 + K + \tfrac{11}{30}\right), \quad K = 0, 1, 2, \ldots \quad \text{(XIX.47)}$$

La energía corregida resulta

$$\begin{aligned} E &= -D + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2MR_0^2} + \hbar\omega_0\left(K + \tfrac{1}{2}\right) \\ &\quad + \frac{3\hbar^2 c}{2M^2\omega_0^2}\left(K^2 + K + \tfrac{1}{2}\right) - \frac{30\hbar^2 b^2}{8M^3\omega_0^4}\left(K^2 + K + \tfrac{11}{30}\right) \\ &= -D + \hbar\omega_0\left(K + \tfrac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left(K^2 + K + \tfrac{1}{4}\right) + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2MR_0^2}, \end{aligned} \quad \text{(XIX.48)}$$

es decir,

$$E = -D + \hbar\omega_0\left(K + \tfrac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left(K + \tfrac{1}{2}\right)^2 + \frac{\hbar^2 L\,(L+1)}{2MR_0^2}. \quad \text{(XIX.49)}$$

Vemos que las correcciones debidas a los términos de tercer y cuarto orden resultan de orden similar, y juntas dan lugar a un término $\sim \left(K+\frac{1}{2}\right)^2$. Para números cuánticos muy grandes, esta corrección es importante, ya que los niveles de energía se encuentran en este caso muy próximos entre sí. Como $a \sim R_0$, las correcciones a la energía vibracional en (XIX.49) son del mismo orden que la energía rotacional, para K y L de orden similar.

XIX.7 Determine los coeficientes del desarrollo de la energía electrónica $\mathcal{E}(R)$ cuando ésta se modela con el potencial de Morse

$$\mathcal{E}(R) = D\left(e^{-2(R-R_0)/a} - 2e^{-(R-R_0)/a}\right),$$

hasta cuarto orden inclusive.

Consideremos el potencial de Morse

$$\mathcal{E}\,(R) = -D + D\left(e^{-(R-R_0)/a} - 1\right)^2 = D\left(e^{-2(R-R_0)/a} - 2e^{-(R-R_0)/a}\right), \tag{XIX.50}$$

donde D representa la energía de disociación y R_0 la distancia de equilibrio, a la cual el potencial alcanza su mínimo $-D$. En una molécula diatómica el movimiento vibracional de los núcleos se produce alrededor de esta distancia de equilibrio, mientras sea de amplitud pequeña. Cuando esto sucede es legítimo desarrollar el potencial en serie de Taylor alrededor de R_0. De (XIX.50), considerando que $\mathcal{E}'(R_0) = 0$, se tiene

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(R) &= \mathcal{E}(R_0) + \frac{(R-R_0)^2}{2!}\mathcal{E}''(R_0) + \frac{(R-R_0)^3}{3!}\mathcal{E}'''(R_0) \\ &\quad + \frac{(R-R_0)^4}{4!}\mathcal{E}^{iv}(R_0) + \cdots\end{aligned} \tag{XIX.51}$$

De (XIX.50) y sus derivadas se obtiene

$$\mathcal{E}(R_0) = -D, \quad \mathcal{E}''(R_0) = \frac{2D}{a^2}, \tag{XIX.52}$$

$$\mathcal{E}'''(R_0) = -\frac{6D}{a^3}, \quad \mathcal{E}^{iv}(R_0) = \frac{14D}{a^4}, \quad \cdots \tag{XIX.53}$$

Insertando estos coeficientes en el desarrollo anterior, queda hasta cuarto orden

$$\mathcal{E}\,(R) = -D + \frac{D}{a^2}\,(R-R_0)^2 - \frac{D}{a^3}\,(R-R_0)^3 + \frac{7}{12}\frac{D}{a^4}\,(R-R_0)^4\,. \tag{XIX.54}$$

Este potencial se puede identificar con el de un oscilador perturbado, cuya frecuencia de vibración está dada por la relación

$$\tfrac{1}{2}M\omega_0^2 = \frac{D}{a^2}. \tag{XIX.55}$$

Con esta identificación queda finalmente

$$\mathcal{E}\,(R) = -D + \tfrac{1}{2}M\omega_0^2\,(R-R_0)^2 - \frac{M\omega_0^2}{2a}\,(R-R_0)^3 + \frac{7M\omega_0^2}{24a^2}\,(R-R_0)^4\,. \tag{XIX.56}$$

Una forma un poco más transparente de este resultado es

$$\mathcal{E}\,(R) = -D + \tfrac{1}{2}M\omega_0^2\,(R-R_0)^2\left[1 - \frac{R-R_0}{a} + \tfrac{7}{12}\left(\frac{R-R_0}{a}\right)^2\right]. \tag{XIX.57}$$

Vemos que mientras la cantidad $(R - R_0)/a$ permanezca pequeña, la corrección al potencial armónico se mantiene pequeña.

XIX.8 Determine el orden de magnitud de la longitud de onda de la radiación emitida durante una transición vibracional $K = 1 \to K = 0$ en una molécula de LiH. Suponga que la distancia de equilibrio de los átomos de una molécula diatómica es similar a la distancia entre átomos en un cristal de la misma sustancia. *Observación*: la latiz del LiH es cúbica y el cristal tiene una densidad aproximada de $0.83\ \mathrm{g/cm^3}$.

Consideremos un cristal cúbico simple de LiH, con peso molecular M' igual a 7.947 g/g-mol y densidad ρ de $0.83\ \mathrm{g/cm^3}$. La masa de la molécula de LiH es

$$m = \frac{M'}{N_A} = \frac{7.947\,\mathrm{g/g\text{-}mol}}{6.023 \times 10^{23}\,\mathrm{moléculas/g\text{-}mol}} = 1.319 \times 10^{-23}\,\mathrm{g/molécula}, \tag{XIX.58}$$

donde N_A es el número de Avogadro. El número de moléculas por unidad de volumen es

$$N = \frac{\rho}{m} = \frac{0.83\,\mathrm{g/cm^3}}{1.319 \times 10^{-23}\,\mathrm{g/molécula}} = 6.293 \times 10^{22}\,\mathrm{molécula/cm^3}, \tag{XIX.59}$$

y dado que cada molécula de LiH contiene dos átomos, el número de átomos por $\mathrm{cm^3}$ resulta

$$2N = 1.259 \times 10^{23}\,\mathrm{átomos/cm^3}. \tag{XIX.60}$$

Si hay n átomos a lo largo de la arista de un cubo de volumen 1 $\mathrm{cm^3}$, de $n^3 = 1.259 \times 10^{23}$ átomos/$\mathrm{cm^3}$ se obtiene que

$$n = 5.012 \times 10^{7}\,\mathrm{átomos/cm}. \tag{XIX.61}$$

La distancia entre átomos resulta

$$R_0 = \frac{1}{n}\,\mathrm{cm} = 1.995 \times 10^{-8}\,\mathrm{cm}. \tag{XIX.62}$$

Esta estimación no está muy alejada del valor tabulado, $R_0 = 1.595 \times 10^{-8}$ cm.[2]

Durante una transición vibracional $K = 1 \to K = 0$ puede modificarse el número cuántico rotacional, por lo que las frecuencias radiadas son las dadas por la ecuación (T19.40) con $K = 1$,

$$\omega^{\pm} = \frac{E(1, L) - E(0, L \pm 1)}{\hbar} = \omega_0 + \begin{cases} 2BL \\ -2B(L+1) \end{cases}, \tag{XIX.63}$$

donde

$$B = \frac{\hbar}{2MR_0^2} = \frac{\hbar}{2I}, \tag{XIX.64}$$

con M la masa reducida de la molécula. En el presente caso tenemos

$$M = \frac{M_{Li}M_H}{M_{Li} + M_H} = \frac{1.00797 \times 6.939}{7.947}\,\mathrm{uam} = 1.461 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}; \tag{XIX.65}$$

$$B = \frac{1.0546 \times 10^{-34}\ \mathrm{kg \cdot m^2/s}}{2\,(1.461 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg})\,(1.995 \times 10^{-10}\,\mathrm{m})^2} = 9.068 \times 10^{11}\,\mathrm{s^{-1}}. \tag{XIX.66}$$

[2] E. U. Condon, *Handbook of Physics* (1967), p. 7-113.

Por otro lado, de las ecuaciones (T19.39) o (XIX.34) con $D = |E_{\text{elect}}|$ tenemos que

$$D \sim \frac{\hbar^2}{ma^2}, \tag{XIX.67}$$

$$\hbar\omega_0 \sim \sqrt{\frac{m}{M}}\frac{\hbar^2}{ma^2}, \tag{XIX.68}$$

con m la masa del electrón y a la distancia característica intermolecular, que tomaremos como R_0 en una primera aproximación. Con esto se obtiene

$$\begin{aligned} D &\sim \frac{\left(1.0546 \times 10^{-34}\ \text{kg}\cdot\text{m}^2/\text{s}\right)^2}{(9.1091 \times 10^{-31}\,\text{kg})\,(1.995 \times 10^{-10}\,\text{m})^2} \\ &= 3.068 \times 10^{-19}\text{kg}\cdot\,\text{m}^2/\text{s}^2 = 1.915\ \text{eV}. \end{aligned} \tag{XIX.69}$$

De la ecuación (XIX.63) sigue que la frecuencia de la radiación emitida está dada aproximadamente por

$$\omega^+ \sim \omega_0 + 2B, \tag{XIX.70}$$

con ω_0 dado por la ecuación (XIX.55) como

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{2D}{Ma^2}} \sim 1.03 \times 10^{14}\text{s}^{-1}. \tag{XIX.71}$$

La frecuencia de la radiación emitida es del orden de

$$\omega^+ \sim 1.048 \times 10^{14}\,\text{s}^{-1} \tag{XIX.72}$$

y le corresponde una longitud de onda en el infrarrojo, del orden de

$$\lambda^+ = \frac{2\pi c}{\omega^+} \sim 1.8 \times 10^{-5}\,\text{m}. \tag{XIX.73}$$

XIX.9 En la figura 19.7 del texto se muestra el espectro de absorción del vapor de HCl en el cercano infrarrojo; con su ayuda, muestre que la distancia de equilibrio entre los átomos de H y Cl de esta molécula es del orden de 1.3×10^{-8} cm.

Las líneas espectrales del HCl en el cercano infrarrojo corresponden a transiciones vibracionales, para las que los espectros de emisión y absorción coinciden, por lo que basta estudiar las emisiones. Durante una emisión por una molécula diatómica el número cuántico vibracional K se reduce en la unidad, pero el número cuántico rotacional L puede aumentar ($L \to L+1$) o disminuir ($L \to L-1$) ($\Delta L = 0$ corresponde a una transición prohibida). Las frecuencias radiadas están dadas por la expresión (XIX.63), la que da, considerando dos líneas sucesivas,

$$\Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right) = \frac{\Delta\omega}{2\pi c} = \frac{B}{\pi c} = \frac{\hbar}{2\pi c M R_0^2} = \frac{\hbar}{2\pi c I}. \tag{XIX.74}$$

Despejando, se obtiene para el momento de inercia de la molécula:

$$I = MR_0^2 = \frac{\hbar}{2\pi c\Delta\left(\lambda^{-1}\right)}. \tag{XIX.75}$$

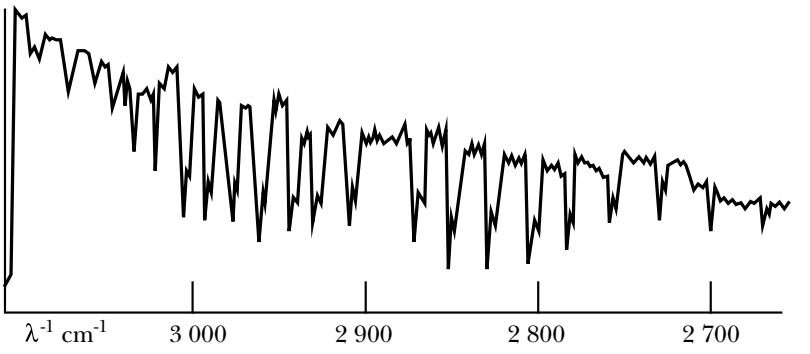


FIGURA XIX.1 *Absorción de radiación electromagnética por HCl.*

De la figura XIX.1 (que corresponde a parte de la 19.7 del texto) se observa que $\Delta(\lambda^{-1}) \sim 21\ \mathrm{cm}^{-1}$; con este valor sustituido en la expresión anterior, se obtiene para el momento de inercia

$$I = \frac{1.0546 \times 10^{-34}\ \mathrm{kg}\cdot\ \mathrm{m}^2/\mathrm{s}}{2\pi\,(3\times 10^8\,\mathrm{m/s})\,(21\times 10^2\,\mathrm{m}^{-1})} = 2.67\times 10^{-47}\,\mathrm{kg}\ \cdot\mathrm{m}^2 = 2.67\times 10^{-40}\,\mathrm{g}\cdot\mathrm{cm}^2. \tag{XIX.76}$$

Como la masa reducida de la molécula de HCl es

$$M = \frac{M_H M_{Cl}}{M_H + M_{Cl}} = \frac{1\times 35}{1+35}\,\mathrm{uam} = \frac{35}{36} 1.6604\times 10^{-27}\,\mathrm{Kg} = 1.614\times 10^{-24}\,\mathrm{g}, \tag{XIX.77}$$

podemos escribir

$$R_0^2 = \frac{I}{M} = \frac{2.677\times 10^{-40}\,\mathrm{g\,cm}^2}{1.614\times 10^{-24}\,\mathrm{g}} = 1.659\times 10^{-16}\ \mathrm{cm}^2, \tag{XIX.78}$$

de donde sigue que la distancia de equilibrio entre los átomos de H y de Cl de esta molécula es

$$R_0 = 1.29\times 10^{-8}\ \mathrm{cm}. \tag{XIX.79}$$

XIX.2. Problemas adicionales

XIX.10 Determine el espectro rotacional y vibracional de una molécula diatómica cuando el potencial electrónico para el movimiento nuclear se modela con la función

$$V(\rho) = -2D\left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2\rho^2}\right), \quad \rho = \frac{R}{a}.$$

La ecuación de Schrödinger para el movimiento nuclear (T19.28) toma en el presente caso la forma

$$\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\psi + \left[E + 2D\left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2\rho^2}\right)\right]\psi = 0. \tag{XIX.80}$$

Esta ecuación es análoga a la de un átomo de hidrógeno, por lo que podemos escribir directamente la solución por comparación. La separación de las variables angulares conduce a la siguiente ecuación para la función radial $\varphi(\rho)$:

$$\frac{d^2\varphi}{d\rho^2} + \left(-\mu^2 + \frac{2\gamma^2}{\rho} - \frac{\gamma^2 + L(L+1)}{\rho^2}\right)\varphi = 0, \tag{XIX.81}$$

donde

$$\mu = \sqrt{-\frac{2Ma^2E}{\hbar^2}}, \quad \gamma = \sqrt{\frac{2Ma^2D}{\hbar^2}}. \tag{XIX.82}$$

La solución apropiada de esta ecuación es

$$\varphi(\rho) = C\rho^s e^{-\mu\rho} F\left(s - \frac{\gamma^2}{\mu}, 2s; 2\mu\rho\right), \tag{XIX.83}$$

donde F es una función hipergeométrica confluente. Como sabemos, para que esta $\varphi(\rho)$ se comporte correctamente en el infinito se requiere que F se reduzca a un polinomio, lo que ocurre sólo si

$$s - \frac{\gamma^2}{\mu} = -n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{XIX.84}$$

Sustituyendo en esta expresión los valores de γ y μ dados en (XIX.82) se obtiene el espectro de energías[3]

$$E_{nL} = -\frac{\hbar^2}{2Ma^2} \frac{\gamma^4}{\left(n + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + \left(L + \frac{1}{2}\right)^2}\right)^2}. \tag{XIX.85}$$

En las aplicaciones normalmente ocurre que $\gamma \gg 1$, por lo que para números cuánticos no muy grandes se cumple que n, $L \ll \gamma$. Para estos casos es legítimo desarrollar la expresión anterior en serie y escribir aproximadamente

$$\begin{aligned} E_{nL} &= -D + \hbar\omega_0 \left(n + \tfrac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left(L + \tfrac{1}{2}\right)^2 - \frac{3\hbar^2}{2Ma^2}\left(n + \tfrac{1}{2}\right)^2 \\ &\quad - \frac{3\hbar^3}{2M^2a^4\omega_0}\left(n + \tfrac{1}{2}\right)\left(L + \tfrac{1}{2}\right), \end{aligned} \tag{XIX.86}$$

donde ω_0 está dada por la ecuación (XIX.55), es decir,

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{2D}{Ma^2}}.$$

De (XIX.86) vemos que la energía de disociación está dada aproximadamente por

$$E_0 = D - \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0 \tag{XIX.87}$$

(el mínimo de $V(\rho)$ ocurre para $\rho = 1$ y vale $-D$). Los términos segundo y tercero de (XIX.86) corresponden a la energía vibracional y rotacional, respectivamente. El cuarto término es una corrección anarmónica a la energía vibracional, mientras que el quinto da la corrección debida al acoplamiento rotacional y vibratorio. Al igual que sucede con el potencial de Morse, el potencial aquí analizado también predice que las energías electrónica, vibracional y rotacional satisfacen la relación

$$D : \hbar\omega_0 : \frac{\hbar^2}{2Ma^2}, \text{ es decir, } 1 : \sqrt{\frac{m}{M}} : \frac{m}{M}. \tag{XIX.88}$$

[3]Este resultado ejemplifica, aunque sea con un caso particular, la afirmación hecha en el capítulo 13 del texto, en el sentido de que cualquiera que sea la intensidad de un potencial del tipo const/r^2 que se le agregue al átomo de hidrógeno, se rompe la degeneración en l (que aquí aparece como L).

XIX.11 Exprese el potencial efectivo del problema anterior,

$$W(R) = -2D\left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2\rho^2}\right) + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2mR^2}, \quad \rho = \frac{R}{a},$$

cerca de su mínimo en la forma de un potencial de oscilador armónico y encuentre los niveles de energía para oscilaciones pequeñas.

Podemos escribir el potencial efectivo en la forma

$$W(\rho) = -2D\left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2\rho^2}\right) + \frac{A^2}{\rho^2}, \tag{XIX.89}$$

$$A^2 = \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2Ma^2}. \tag{XIX.90}$$

El mínimo de este potencial ocurre para la distancia ρ_0, para la que se satisface la condición

$$W'(\rho_0) = -2D\left(-\frac{1}{\rho_0^2} + \frac{1}{\rho_0^3}\right) - \frac{2A^2}{\rho_0^3} = 0, \tag{XIX.91}$$

y resulta

$$\rho_0 = 1 + \frac{A^2}{D}. \tag{XIX.92}$$

Cuando el movimiento vibracional de los núcleos alrededor de la posición de equilibrio $R_0 = a\rho_0$ es de amplitud pequeña, es legítimo desarrollar el potencial en serie de Taylor alrededor de R_0 y escribir

$$\begin{aligned} W(\rho) &= W(\rho_0) + \frac{1}{2!}W''(\rho_0)(\rho-\rho_0)^2 + \cdots \\ &\approx -2D\left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{2\rho_0^2}\right) + \frac{A^2}{\rho_0^2} + \frac{D+A^2}{\rho_0^4}(\rho-\rho_0)^2. \end{aligned} \tag{XIX.93}$$

Sustituimos aquí (XIX.92) y mantenemos los términos hasta segundo orden en A, con lo que se obtiene como expresión aproximada para el potencial

$$W(\rho) = -D + A^2 + (D - 3A^2)(\rho - \rho_0)^2. \tag{XIX.94}$$

La ecuación radial de Schrödinger para el movimiento nuclear debido a este potencial se obtiene de (T19.28),

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \frac{2Ma^2}{\hbar^2}\left[E + D - A^2 - \left(D - 3A^2\right)(\rho-\rho_0)^2\right]u = 0, \tag{XIX.95}$$

y corresponde a la descripción de un oscilador armónico. Los niveles de energía vibracional son

$$E_{vL} = -D + A^2 + \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right), \tag{XIX.96}$$

en donde la frecuencia de oscilación resulta

$$\omega = \omega_0\left(1 - \frac{3A^2}{2D}\right), \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{2D}{Ma^2}}. \tag{XIX.97}$$

Insertando en las expresiones anteriores el valor de A^2 dado por la ecuación (XIX.90) se encuentra para la energía

$$E_{vL} = -D + \hbar\omega_0\left(n + \tfrac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2Ma^2}L(L+1) - \frac{3\hbar^3}{2M^2a^4\omega_0}L(L+1)\left(n + \tfrac{1}{2}\right). \tag{XIX.98}$$

El término $-\left(3\hbar^2/2Ma^2\right)\left(n+\frac{1}{2}\right)^2$ que apareció en el problema anterior debido a efectos anarmónicos, se puede obtener conservando términos de orden mayor en el desarrollo (XIX.93).

XIX.12 En los cálculos realizados en los problemas XIX.1 y XIX.2 para determinar la energía del ion H_2^+ con el método variacional, se requirió calcular ciertas integrales múltiples. Demuestre que el uso de coordenadas elípticas simplifica considerablemente la evaluación de dichas integrales.

Las coordenadas utilizadas en el problema XIX.1 son $\mathbf{R}_A$, $\mathbf{R}_B$ y $\mathbf{r}$, y representan la posición de los núcleos A y B y del electrón, respectivamente. Llamando $\mathbf{R}$ al vector que une los núcleos y $\mathbf{r}_A$ y $\mathbf{r}_B$ al vector que une el electrón con el núcleo A y B, respectivamente, se tiene

$$\mathbf{r}_A = \mathbf{r} - \mathbf{R}_A, \quad \mathbf{r}_B = \mathbf{r} - \mathbf{R}_B, \quad \mathbf{R} = \mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B. \tag{XIX.99}$$

Introducimos un sistema de coordenadas elípticas (μ, ν, ϕ), definidas como sigue:

$$\mu = \frac{r_A + r_B}{R}, \quad 1 \leq \mu \leq \infty; \tag{XIX.100}$$

$$v = \frac{r_A - r_B}{R}, \quad -1 \leq \nu \leq 1; \tag{XIX.101}$$

$$\phi, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi. \tag{XIX.102}$$

El origen de coordenadas se ha colocado en el centro de la línea que une los núcleos, la que se encuentra sobre el eje Oz; el ángulo ϕ se mide desde el plano xOz, de tal forma que al eje Oy corresponde $\phi = \pi/2$. El elemento de volumen es

$$d\tau = \tfrac{1}{8}R^3\left(\mu^2 - \nu^2\right) d\mu d\nu d\phi. \tag{XIX.103}$$

Los orbitales atómicos hidrogenoides (en unidades atómicas) son

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_A}, \quad \psi_B = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_B}. \tag{XIX.104}$$

Una primera integral de interés es el traslape entre los estados A y B,

$$S = \langle A \,|B\rangle = \langle B \,|A\rangle = \frac{1}{\pi}\int e^{-(r_A + r_B)} d\tau = \frac{1}{\pi}\int e^{-R\mu} d\tau. \tag{XIX.105}$$

El cálculo de esta integral es directo:

$$\begin{aligned} S &= \frac{R^3}{8\pi}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d\nu \int_1^{\infty} d\mu e^{-R\mu}\left(\mu^2 - \nu^2\right) \\ &= \frac{R^3}{4}\int_1^{\infty} \mu^2 e^{-R\mu} d\mu \int_{-1}^{1} d\nu - \int_1^{\infty} e^{-R\mu} d\mu \int_{-1}^{1} \nu^2 d\nu \\ &= \frac{R^3}{4}\left[2\frac{2e^{-R}}{R^3}\left(1 + R + \tfrac{1}{2}R^2\right) - \frac{2}{3}\frac{e^{-R}}{R}\right], \end{aligned} \tag{XIX.106}$$

es decir,

$$S = e^{-R}\left(1 + R + \tfrac{1}{3}R^2\right). \tag{XIX.107}$$

Éste es el resultado ya conocido, ecuación (XIX.13), pero obtenido aquí de manera significativamente más simple.

Las otras integrales que resultaron laboriosas de evaluar en el problema XIX.2 son del tipo

$$\langle A| \frac{1}{r_B} |A\rangle = \frac{1}{\pi} \int \frac{1}{r_B} e^{-2r_A} d\tau. \tag{XIX.108}$$

Se obtiene

$$\begin{aligned} \langle A| \frac{1}{r_B} |A\rangle &= \frac{R^3}{8\pi} 2\pi \int_{-1}^{1} d\nu \int_{1}^{\infty} d\mu \frac{2}{R(\mu-\nu)} e^{-R(\mu+\nu)} (\mu-\nu)(\mu+\nu) \\ &= \frac{R^2}{2} \left[\int_1^\infty \mu e^{-R\mu} d\mu \int_{-1}^{1} e^{-R\nu} d\nu + \int_1^\infty e^{-R\mu} d\mu \int_{-1}^{1} \nu e^{-R\nu} d\nu \right] \\ &= \frac{1}{R} \left[1 - e^{-2R}(1+R) \right]. \end{aligned} \tag{XIX.109}$$

Este resultado es parte del dado en la ecuación (XIX.20). El resto de integrales requeridas se obtiene de manera similar, y con simplicidad similar.

XIX.13 Considere una molécula diatómica heteronuclear, cuya descripción puede realizarse de manera aproximada (despreciando polarización, hibridización, efectos de espín, etc.) con el orbital molecular

$$\psi = N \left(\psi_A + \lambda \psi_B \right),$$

en donde ψ_A, ψ_B son orbitales atómicos "puros", y cada núcleo es de carga Z. Determine el momento dipolar eléctrico de esta molécula.

La constante de normalización N se puede calcular de inmediato como función del traslape:

$$\int \psi^* \psi d^3r = 1 = N^2 \int \left(\psi_A^2 + \lambda^2 \psi_B^2 + 2\lambda \psi_A \psi_B \right) d^3r = N^2 \left(1 + \lambda^2 + 2\lambda S \right),$$

es decir,

$$N = \left(1 + \lambda^2 + 2\lambda S \right)^{-1/2}, \quad S = \langle A | B \rangle. \tag{XIX.110}$$

Para simplificar el cálculo es conveniente colocar el sistema de referencia de tal manera que se minimice la cantidad $\langle A| z |B\rangle$; esto se consigue, por ejemplo, colocando el núcleo A sobre el eje Oz en $z = -R/2$ y el núcleo B colinealmente en $z = R/2$, donde R es la distancia internuclear. El momento dipolar eléctrico de la molécula resulta así, tomando en cuenta la simetría axial del sistema,

$$\begin{aligned} \mu &= -Z \int \psi^* \left(z + \frac{R}{2} + z - \frac{R}{2} \right) \psi d^3r \\ &= -2ZN^2 \left(\langle A| z |A\rangle + \lambda^2 \langle B| z |B\rangle + 2\lambda \langle A| z |B\rangle \right) \\ &= -2ZN^2 \left(-\frac{R}{2} + \lambda^2 \frac{R}{2} + 2\lambda \langle A| z |B\rangle \right) \\ &\simeq ZN^2 \left(1 - \lambda^2 \right) R, \end{aligned} \tag{XIX.111}$$

donde se ha aproximado $\langle A| z |A\rangle$ y $\langle B| z |B\rangle$ con $-R/2$ y $R/2$, respectivamente, y en el último paso se despreció la contribución $\langle A| z |B\rangle$, que se supone que es pequeña. De esta manera se obtiene la expresión aproximada

$$\mu = ZR \frac{1 - \lambda^2}{1 + \lambda^2 + 2\lambda S(R)}. \tag{XIX.112}$$

* **XIX.14** Demuestre que las fuerzas de van der Waals tienen la propiedad de ser aditivas, es decir, que la energía de interacción entre dos átomos asociada a ellas no depende de la existencia de otros átomos similares en la vecindad. Esto significa que la energía de van der Waals de un conjunto de átomos es la suma de las energías de interacción entre los pares individuales de átomos del conjunto.

Consideraremos por simplicidad un sistema compuesto por tres átomos similares; al final será claro que la demostración se puede hacer extensiva a un número arbitrario de átomos. Los tres átomos, considerados a grandes distancias, se denotan con a, b, c, sus coordenadas con 1, 2, 3, y sus estados con k, l, n, respectivamente. La energía de interacción entre ellos debida a las fuerzas de van der Waals entre parejas de átomos se puede escribir en la forma

$$V = V(1,2) + V(2,3) + V(3,1). \tag{XIX.113}$$

A su vez, la función de onda se puede escribir, en primera aproximación, como

$$\psi(1,2,3) = \psi_{ak}(1)\psi_{bl}(2)\psi_{cn}(3). \tag{XIX.114}$$

Como por hipótesis los átomos se encuentran alejados entre sí, se pueden ignorar totalmente los efectos de intercambio y no se hace necesario (anti)simetrizar la función de onda, como se ha hecho al escribir (XIX.114). La energía de interacción está dada por la expresión de segundo orden

$$E^{\mathrm{vdW}} = \sum{}' \frac{|\langle 000|\, V\, |kln\rangle|^2}{E_{a0} + E_{b0} + E_{c0} - E_{ak} - E_{bl} - E_{cn}}. \tag{XIX.115}$$

La prima sobre la suma significa que los estados k, l, n no deben ser simultáneamente cero.

Analizaremos por separado los términos de diferentes tipos que aparecen en esta expresión.

a) Todas las contribuciones para las cuales $k \neq 0$, $l \neq 0$, $n \neq 0$ simultáneamente, se anulan, pues cada uno de los tres términos de que consta la V de la ecuación (XIX.113) depende de las variables de sólo dos moléculas, lo que anula el correspondiente elemento de matriz en (XIX.115) por ortogonalidad.

b) Las tres sumas con $k = l = 0$, $n \neq 0$, y sus dos permutaciones cíclicas, representan la energía de interacción debida a la polarización de la molécula n, inmersa en el campo producido por las otras dos (y sus permutaciones). Si se supone que la distribución de las moléculas posee simetría esférica, estas sumas se anulan. (Si estas sumas no se anulan por ausencia de simetría, la energía asociada a ellas *no* resulta aditiva).

c) Términos en los cuales dos índices son diferentes de cero. Esta contribución se puede separar en tres sumas parciales:

$$E^{\mathrm{vdW}} = \sum_{k\neq 0, l\neq 0}{}' \frac{|\langle 000|\, V\, |kl0\rangle|^2}{E_{a0} + E_{b0} - E_{ak} - E_{bl}} + (n \leftrightarrow k) + (l \leftrightarrow k)\,. \tag{XIX.116}$$

Debido a la ortogonalidad de las funciones de onda, en cada caso el único elemento de matriz $\langle 000|\, V\, |kl0\rangle$ que puede no anularse corresponde a la contribución de $V(1,2)$; puesto que esto se repite en cada una de las tres sumas parciales anteriores, la expresión (XIX.116) se ha reducido a la suma de tres contribuciones, cada una de las cuales describe la interacción de van der Waals entre una pareja de moléculas, sin referencia alguna a la presencia de las restantes. Esto es precisamente lo que se deseaba demostrar.

La derivación que se acaba de hacer muestra que la excepcional propiedad aditiva de las fuerzas de dispersión se debe a la cancelación de los términos discutidos en el inciso b) anterior. Como un fenómeno similar no se da en el caso clásico análogo, la propiedad de aditividad resulta característica del dominio cuántico.

XIX.3. Ejercicios

XIX.15 Calcule el cociente de las diferencias de energía entre los dos primeros niveles rotacionales y entre los dos primeros niveles vibracionales para la molécula HF. El momento de inercia de esta molécula es igual a 1.35×10^{-40} g·cm^2 y para la frecuencia de vibración se tiene $\Delta\nu = 3987$ cm^{-1}.

XIX.16 Determine la energía de disociación de la molécula D_2, a partir del hecho de que la energía de disociación y la energía mínima de vibración de la molécula H_2 valen 4.46 eV y 0.26 eV, respectivamente.

XIX.17 Demuestre que no existe la molécula He_2^{3+}.

XIX.18 Una descripción empírica del potencial de la molécula de NaCl es

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R} + Ae^{-R/a},$$

donde R es la distancia internuclear. La distancia internuclear de equilibrio es 2.5Å y la energía de disociación es 3.6 eV. Explique el significado físico de A y a y determine el valor de A y de a/R_0.

XIX.19 Compare los niveles rotacional y vibracional de una molécula de HCl determinados con el potencial

$$V(r) = 4\alpha\left[\left(\frac{d}{r}\right)^{12} - \left(\frac{d}{r}\right)^{6}\right], \quad \alpha = 3.1\times10^{-12}\,\text{eV}, \quad d = 3.3\text{Å}.$$

Sugerencia: Dado que la posición de equilibrio r_0 depende débilmente del momento angular, se puede desarrollar el potencial efectivo alrededor de r_0. Es conveniente introducir $b = \hbar^2/md^2$ y expresar al potencial en términos de b y de $x_0 = r_0/d$.

XIX.20 La frecuencia de vibración de la molécula de CO en su estado más bajo es $\nu_0 = 2\times10^{13}$ Hz. ¿Cuál es la longitud de onda de la radiación emitida en la excitación vibracional más baja? ¿Cuál es la probabilidad de que el primer estado vibracional esté excitado? Compare su resultado con la probabilidad de que la molécula de CO esté en su estado base vibracional cuando la temperatura es 300^0K.

XIX.21 El hamiltoniano de un cuerpo rígido que gira está dado por

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^{3} \frac{1}{2I'_\alpha} \left(\hat{L}'_\alpha\right)^2,$$

donde $\hat{L}'_\alpha$ es una componente del momento angular en el marco de referencia rotante. Detemine los eigenvalores de $\hat{H}$ para una molécula diatómica. *Sugerencia*: $\left[\hat{L}'_\alpha, \hat{L}'_\beta\right] = -i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}'_\gamma$; introduzca $\hat{L}_\alpha = -\hat{L}'_\alpha$ y utilice la simetría rotacional del hamiltoniano.

XIX.22 Demuestre que el operador del cuadrado del momento angular total de una molécula diatómica puede escribirse en la forma

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = -\left[\frac{1}{\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\hat{M}_\varsigma\cos\theta\right)^2\right] + \hat{M}_\xi^2.$$

XIX.23 Establezca la relación que se da entre el espín total de los núcleos de una molécula de D_2 que se encuentra en un estado Σ y los posibles valores del número cuántico rotacional.

XX. Teoría de la dispersión

XX.1. Problemas del texto

XX.1 Derive las relaciones (T20.1) y (T20.2) que permiten pasar del sistema de laboratorio al sistema CM y viceversa en un problema de dos partículas.

Para el análisis de la colisión de dos partículas resulta muy conveniente utilizar las coordenadas relativas y del centro de masa, definidas en términos de las posiciones $\mathbf{r}_1$ y $\mathbf{r}_2$ de las partículas 1 y 2 de masa m_1, m_2, respectivamente, en la forma usual

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{M} = \frac{m}{m_2}\mathbf{r}_1 + \frac{m}{m_1}\mathbf{r}_2, \tag{XX.1}$$

en donde $M = m_1 + m_2$ es la masa total del sistema y $m = m_1m_2/M$ es su masa reducida. Invirtiendo estas expresiones se obtiene

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m}{m_1}\mathbf{r}, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m}{m_2}\mathbf{r}. \tag{XX.2}$$

Las posiciones de las partículas referidas al sistema CM, $\mathbf{r}_1^*$ y $\mathbf{r}_2^*$, se definen mediante las relaciones

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \mathbf{r}_1^*, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} + \mathbf{r}_2^* \tag{XX.3}$$

y resultan de inmediato, usando (XX.2),

$$\mathbf{r}_1^* = \frac{m}{m_1}\mathbf{r}, \quad \mathbf{r}_2^* = -\frac{m}{m_2}\mathbf{r}. \tag{XX.4}$$

Las velocidades de las partículas en un sistema L ligado al laboratorio son $\mathbf{v}_1 = \dot{\mathbf{r}}_1$ y $\mathbf{v}_2 = \dot{\mathbf{r}}_2$, por lo que la velocidad del centro de masa y la velocidad relativa resultan

$$\mathbf{V} = \frac{m_1\mathbf{v}_1 + m_2\mathbf{v}_2}{M}, \quad \mathbf{v} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2. \tag{XX.5}$$

De aquí sigue

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{V} + \frac{m}{m_1}\mathbf{v}, \quad \mathbf{v}_2 = \mathbf{V} - \frac{m}{m_2}\mathbf{v}. \tag{XX.6}$$

Derivando respecto del tiempo las expresiones (XX.3), se obtiene

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{V} + \mathbf{v}_1^*, \quad \mathbf{v}_2 = \mathbf{V} + \mathbf{v}_2^*, \tag{XX.7}$$

y comparando con (XX.6) (o bien, derivando (XX.4)),

$$\mathbf{v}_1^* = \frac{m}{m_1}\mathbf{v}, \quad \mathbf{v}_2^* = -\frac{m}{m_2}\mathbf{v}. \tag{XX.8}$$

El momento lineal total del sistema sigue de (XX.5), y es

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = m_1\mathbf{v}_1 + m_2\mathbf{v}_2 = M\mathbf{V}. \tag{XX.9}$$

A su vez, el momento asociado al movimiento relativo se puede escribir en las formas alternativas

$$m\mathbf{v} = \mathbf{p}_1^* = -\mathbf{p}_2^* = \frac{m}{m_1}\mathbf{p}_1 - \frac{m}{m_2}\mathbf{p}_2, \tag{XX.10}$$

con $\mathbf{p}_1^* = m_1\mathbf{v}_1^*$, $\mathbf{p}_2^* = m_2\mathbf{v}_2^*$. De (XX.10) sigue, en particular, que $\mathbf{p}_1^* + \mathbf{p}_2^* = 0$, como era de esperarse. Las relaciones anteriores se pueden aplicar tanto al sistema inicial (antes de la colisión), como al sistema final (después de ella).

Para establecer la relación que existe entre el ángulo de dispersión visto desde los sistemas L y CM escribimos, con ayuda de la figura XX.1b, en donde θ_{1L} representa al ángulo de dispersión de la partícula 1 en el sistema L y $\theta_{CM} \equiv \theta^*$ representa este ángulo en el sistema CM,

$$v_1^* \operatorname{sen}\theta^* = v_1 \operatorname{sen}\theta_{1L}, \tag{XX.11}$$

$$v_1^* \cos\theta^* + V = v_1 \cos\theta_{1L}. \tag{XX.12}$$

El cociente de estas dos expresiones conduce a

$$\tan\theta_{1L} = \frac{\operatorname{sen}\theta^*}{\cos\theta^* + V/v_1^*}. \tag{XX.13}$$

De las relaciones (XX.8) y (XX.9) es inmediato que

$$\frac{V}{v_1^*} = \frac{P}{m_2 v} = \frac{m_1}{m_2}\left[\frac{(\mathbf{v}_1 + (m_2/m_1)\mathbf{v}_2)^2}{(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)^2}\right]^{1/2}. \tag{XX.14}$$

Supondremos que el blanco, tomado como la partícula 2, se encuentra inicialmente en reposo, de tal forma que $v_2 = 0$; de la última ecuación sigue que

$$\frac{V}{v_1^*} = \frac{m_1}{m_2} \tag{XX.15}$$

y (XX.13) toma la forma

$$\tan\theta_{1L} = \frac{\operatorname{sen}\theta^*}{\cos\theta^* + m_1/m_2}, \tag{XX.16}$$

que corresponde a la ecuación (T20.1) que había que demostrar (véase ejercicio XX.33). De aquí sigue, en particular, que cuando $m_1/m_2 > 1$, el ángulo de dispersión θ_{1L} no puede alcanzar el valor $\pi/2$.

Cuando no hay fuerzas actuando en el interior del sistema o sobre él, la energía total es puramente cinética y está dada por

$$E_L = \tfrac{1}{2}m_1\mathbf{v}_1^2 + \tfrac{1}{2}m_2\mathbf{v}_2^2 = \tfrac{1}{2}M\mathbf{V}^2 + \tfrac{1}{2}m\mathbf{v}^2 = E_{CM} + E_r. \tag{XX.17}$$

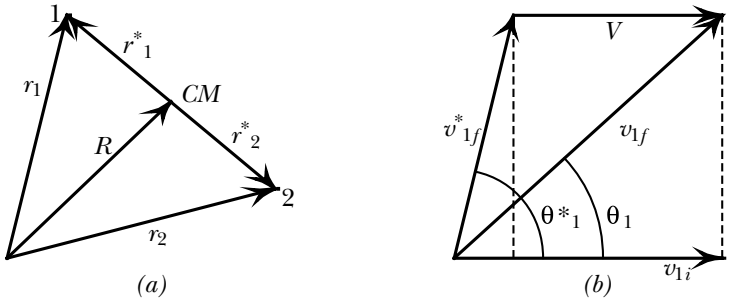


FIGURA XX.1 *Coordenadas de laboratorio y CM; en (a) se muestran los vectores de posición y en (b) las velocidades.*

La energía $E_{CM} = \frac{1}{2}M\mathbf{V}^2$ es la asociada al centro de masa, mientras que $E_r = \frac{1}{2}mv^2$ es la debida al movimiento relativo. En el caso particular analizado arriba en que $v_2 = 0$ se tiene que

$$E_L = \tfrac{1}{2}m_1 v_1^2,\ E_r = \tfrac{1}{2}mv_1^2 \Rightarrow E_r = \frac{m}{m_1}E_L \tag{XX.18}$$

y la ecuación anterior se reduce a (véase ejercicio XX.34)

$$E_L = E_{CM} + \frac{m_2}{M}E_L. \tag{XX.19}$$

Vemos que en este caso la energía asociada al movimiento del centro de masa puede escribirse en términos de la energía definida desde el sistema del laboratorio en la forma

$$E_{CM} = \left(1 - \frac{m_2}{M}\right)E_L = \frac{m_1}{M}E_L. \tag{XX.20}$$

Ésta es la ecuación (T20.2) que se solicita demostrar. Observemos que en casos extremos, como por ejemplo $m_2 \ll m_1$, el CM puede llevarse una parte muy significativa de la energía disponible; para masas iguales, $E_{CM} = E_L/2$.[1]

XX.2 Derive la fórmula (T20.3).

Se trata de encontrar la relación que conecta la sección diferencial de dispersión elástica expresada en el sistema de laboratorio con la correspondiente expresión en el sistema centro de masa. La sección eficaz diferencial de dispersión en una dirección dada se escribe en la forma $d\sigma(\mathbf{\Omega}) = \sigma'(\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega}$, $\sigma'(\mathbf{\Omega}) \equiv d\sigma(\mathbf{\Omega})/d\mathbf{\Omega}$, y se define como lo expresa la ecuación (T20.10), o sea,

$$d\sigma\,(\mathbf{\Omega}) = \frac{\text{número de partículas dispersadas en} d\Omega \text{ en la unidad de tiempo}}{\text{flujo incidente sobre el blanco}}, \tag{XX.21}$$

donde $d\Omega$ es el elemento de ángulo sólido en la dirección $\mathbf{\Omega}$.

Para simplificar la descripción que sigue, consideraremos que el potencial dispersor es central; la simetría resultante alrededor del eje que describe la trayectoria de la partícula incidente permite escribir el elemento de ángulo sólido en la forma

$$d\Omega = 2\pi \operatorname{sen}\theta\, d\theta, \tag{XX.22}$$

[1] Mayores detalles pueden verse en Johnson and Pedersen (1986), capítulo 12.

donde θ es el ángulo entre las direcciones de salida e incidente, es decir, el ángulo en que ocurre la dispersión. De (XX.21) sigue que el número de partículas dispersadas en el ángulo sólido $d\Omega$ por unidad de tiempo es

$$dn\left(\theta\right) = J_{\text{inc}}\sigma'\left(\theta\right) 2\pi \operatorname{sen}\theta \left|d\theta\right|, \tag{XX.23}$$

donde se introdujo el valor absoluto para garantizar que $dn(\theta)$ sea positiva. Como el número de partículas dispersadas en un elemento dado de ángulo sólido es independiente del sistema de referencia (L ó CM) usado para la descripción, debe cumplirse que

$$2\pi J_{\text{inc}}\sigma'\left(\theta_L\right)\operatorname{sen}\theta_L \left|d\theta_L\right| = 2\pi J_{\text{inc}}\sigma'\left(\theta^*\right)\operatorname{sen}\theta^* \left|d\theta^*\right|, \tag{XX.24}$$

o bien, simplificando,

$$\sigma'(\theta_L) = \sigma'(\theta^*)\frac{\operatorname{sen}\theta^*}{\operatorname{sen}\theta_L}\left|\frac{d\theta^*}{d\theta_L}\right| = \sigma'(\theta^*)\left|\frac{d\cos\theta^*}{d\cos\theta_L}\right|. \tag{XX.25}$$

Para determinar la derivada requerida sin complicar excesivamente el cálculo, utilizaremos el mismo caso particular manejado en el problema anterior, es decir, supondremos que la partícula 2 se encuentra en reposo antes de la colisión, $v_2 = 0$, lo que conduce a la relación (XX.16); definiendo $\gamma = m_1/m_2$ podemos escribir en este caso

$$\cos^2\theta_{1L} = \frac{1}{1+\tan^2\theta_{1L}} = \frac{\left(\cos\theta^*+\gamma\right)^2}{1+\gamma^2+2\gamma\cos\theta^*}, \tag{XX.26}$$

es decir, con $\theta_{1L} = \theta_L$,

$$\cos\theta_L = \frac{\cos\theta^*+\gamma}{\sqrt{1+2\gamma\cos\theta^*+\gamma^2}} \tag{XX.27}$$

y

$$\frac{d\cos\theta_L}{d\cos\theta^*} = \frac{1+\gamma\cos\theta^*}{\left(1+2\gamma\cos\theta^*+\gamma^2\right)^{3/2}}. \tag{XX.28}$$

Sustituyendo en (XX.25) se obtiene la expresión solicitada,

$$\sigma'\left(\theta_L\right) = \frac{\left(1+2\gamma\cos\theta^*+\gamma^2\right)^{3/2}}{1+\gamma\cos\theta^*}\sigma'\left(\theta^*\right), \quad \gamma = \frac{m_1}{m_2}. \tag{XX.29}$$

XX.3 Demuestre que para un proceso de colisión del tipo $P_1 + P_2 \to P_3 + P_4$, que puede ser elástico o inelástico de tal manera que la cantidad $Q \equiv E_{\text{cinética final}} - E_{\text{cinética inicial}}$ puede ser diferente de cero, en la fórmula (T20.3) ó (XX.29) la cantidad $\gamma = m_1/m_2$ debe sustituirse por

$$\gamma = \left(\frac{m_1}{m_2}\frac{m_3}{m_4}\frac{E_r}{E_r+Q}\right)^{1/2}, \quad E_r = \tfrac{1}{2}m_{\text{red}}v^2.$$

Consideremos una colisión binaria en la que una partícula de masa m_1 choca con otra en reposo, de masa m_2, y que da como resultado dos partículas, de masas m_3 y m_4. Es claro que $m_1 + m_2 = m_3 + m_4$. En esta generalización del problema XX.1 la ecuación (XX.13) sigue siendo válida, aun si la colisión es inelástica, siempre y cuando el cociente $\gamma = V/v_1^*$ siga representando la razón entre la velocidad del centro de masa en el sistema de laboratorio y la velocidad

de la partícula observada (con masa m_3) en el sistema centro de masa; en otras palabras, debemos poner $\gamma = V/v_3^*$. Ésta es la cantidad que hay que determinar en la nueva situación.

Definimos la energía inicial asociada al movimiento relativo en el sistema centro de masa (con $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_0$, pues $v_2 = 0$ por hipótesis), de acuerdo a la ecuación (XX.17), como

$$E_r = \tfrac{1}{2}\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} v_0^2. \tag{XX.30}$$

A su vez, la energía absorbida durante la colisión queda dada por

$$Q = T_f - T_i = E_{\text{cinética final}} - E_{\text{cinética inicial}} = \tfrac{1}{2}\frac{m_3 m_4}{m_3 + m_4} v^2 - E_r. \tag{XX.31}$$

De aquí sigue que la velocidad relativa de las partículas 3 y 4 después de la colisión es

$$v^2 = \frac{2M}{m_3 m_4}\left(E_r + Q\right). \tag{XX.32}$$

Utilizando (XX.8) podemos escribir (con $m_1 \to m_3$, $m \to m_{34} = m_3 m_4/M$)

$$v_3^* = \frac{m_4}{M} v, \tag{XX.33}$$

con $M = m_1 + m_2 = m_3 + m_4$. Combinando las dos últimas expresiones se obtiene

$$v_3^{*2} = \frac{m_4^2}{M^2} v^2 = \frac{2m_4}{M m_3}\left(E_r + Q\right). \tag{XX.34}$$

Como $v_2 = 0$, se tiene $MV = m_1 v_1 = m_1 v_0$, es decir,

$$V^2 = \frac{m_1^2}{M^2} v_0^2 = \frac{2m_1}{m_2 M}\left(\tfrac{1}{2}\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} v_0^2\right) = \frac{2m_1}{m_2 M} E_r. \tag{XX.35}$$

Utilizando este resultado en combinación con (XX.34), se obtiene

$$\gamma^2 = \frac{V^2}{v_3^{*2}} = \frac{m_1}{m_2}\frac{m_3}{m_4}\frac{E_r}{E_r + Q},$$

lo que conduce a la expresión solicitada:

$$\gamma = \sqrt{\frac{m_1}{m_2}\frac{m_3}{m_4}\frac{E_r}{E_r + Q}}. \tag{XX.36}$$

XX.4 Demuestre que cuando una partícula de masa m colisiona elásticamente con una partícula de masa M en reposo (en el laboratorio), el retroceso de esta última se da siempre dentro del hemisferio frontal en el sistema L.

Se trata de estudiar qué le sucede a la partícula blanco con la colisión. (Nótese el cambio de notación respecto a los problemas precedentes: $m_1 \to m$, $m_2 \to M$.) Denotaremos con $\mathbf{V}$ la velocidad del centro de masa, con $\mathbf{v}_2$ la velocidad de la partícula de masa M *después* de la colisión, vista desde el sistema de laboratorio, y con $\mathbf{v}_2^*$ la misma velocidad, pero vista desde el sistema centro de masa. Llamaremos θ_2 al ángulo formado por $\mathbf{v}_2$ respecto a la dirección de incidencia, es decir, al ángulo de "retroceso" del blanco, y ϕ_{CM} a este mismo ángulo, pero visto desde el sistema CM. Es claro que se cumple que

$$\phi_{CM} = \pi - \theta^*, \tag{XX.37}$$

donde θ^* es el ángulo de dispersión de la partícula 1, estudiado en el problema XX.1. Aplicando a la partícula 2 la ecuación (XX.13) con los cambios apropiados ($\theta_{1L} \to \theta_{2L} \equiv \theta_2$; $\theta^* \to \pi - \theta^*$; $v_1^* \to v_2^*$) se obtiene

$$\tan\theta_2 = \frac{\operatorname{sen}(\pi - \theta^*)}{\cos(\pi - \theta^*) + V/v_2^*}. \tag{XX.38}$$

Por otro lado, de $v_2 = 0$ sigue, utilizando (XX.9) *mutatis mutandis*,

$$P = (m+M)\,V = mv_0 = m\frac{m+M}{m}v_2^* = (m+M)\,v_2^*,$$

es decir,

$$\frac{V}{v_2^*} = 1. \tag{XX.39}$$

De esta manera (XX.38) se reduce a

$$\tan\theta_2 = \frac{\operatorname{sen}(\pi - \theta^*)}{\cos(\pi - \theta^*) + 1} = \tan\frac{1}{2}(\pi - \theta^*). \tag{XX.40}$$

De aquí sigue que

$$\theta_2 = \frac{1}{2}(\pi - \theta^*). \tag{XX.41}$$

Como θ^* puede tomar cualquier valor entre 0 y π, la partícula blanco que originalmente se encontraba en reposo en el sistema de laboratorio, de acuerdo con este resultado sólo puede moverse dentro de un ángulo contenido en el intervalo $\theta_2 \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$, es decir, dentro del hemisferio frontal.

XX.5 Suponga que en la situación descrita en el problema anterior, la dispersión tiene simetría esférica en el sistema CM. ¿Cuál es la distribución angular de las partículas del blanco en el sistema L?

En el sistema CM, antes de la colisión las dos partículas, blanco y proyectil, se acercan en la misma dirección una hacia la otra con momento de igual magnitud, para alejarse en sentidos opuestos después de la colisión. Así pues, si el proyectil, visto desde este sistema de referencia, fue dispersado en un ángulo θ^* con respecto a la dirección de incidencia, el blanco retrocederá formando un ángulo $\theta_{2CM} = \pi - \theta^*$. De aquí sigue que la sección de dispersión para el blanco es

$$\sigma'(\theta_{2CM}) = \sigma'(\pi - \theta^*). \tag{XX.42}$$

Al igual que se hizo en el problema XX.2, hemos supuesto que el potencial dispersor es central, de tal forma que hay simetría alrededor del eje de incidencia. Procediendo con el blanco como se hizo con la partícula 1 en el problema XX.3, se obtiene

$$\sigma'(\theta_2) = \sigma'(\theta_{2CM})\frac{\operatorname{sen}\theta_{2CM}}{\operatorname{sen}\theta_2}\left|\frac{d\theta_{2CM}}{d\theta_2}\right|, \tag{XX.43}$$

con θ_2 el ángulo de retroceso del blanco visto en el sistema del laboratorio. Por otra parte, en el problema anterior se demuestra que el ángulo de retroceso del blanco, en el sistema de laboratorio está relacionado con θ^* por la expresión

$$\theta_2 = \tfrac{1}{2}(\pi - \theta^*) = \tfrac{1}{2}\theta_{2CM}. \tag{XX.44}$$

De aquí que

$$\frac{\operatorname{sen}\theta_{2CM}}{\operatorname{sen}\theta_2} = \frac{\operatorname{sen}2\theta_2}{\operatorname{sen}\theta_2} = 2\cos\theta_2, \tag{XX.45}$$

$$\frac{d\theta_{2CM}}{d\theta_2} = 2. \tag{XX.46}$$

Sustituyendo estos resultados en (XX.43) queda

$$\sigma'(\theta_2) = 4\sigma'(\theta_{2CM})\cos\theta_2. \tag{XX.47}$$

Como en el sistema CM la dispersión es esféricamente simétrica, no depende de θ^*; en consecuencia, $\sigma'(\theta_{2CM})$ tampoco depende de este ángulo, y la sección angular para el blanco toma la forma

$$\sigma'(\theta_2) = A\cos\theta_2, \tag{XX.48}$$

con A una constante. Es interesante notar que esta expresión predice que las partículas blanco retroceden con máxima probabilidad en la dirección de incidencia; esta probabilidad es prácticamente nula para retrocesos en las cercanías de $\pi/2$.

XX.6 Suponga que un haz de partículas con densidad n_0 part/cm^2 se lanza sobre un blanco con sección eficaz total σ. Muestre que si el espesor del blanco es d, el haz que lo cruza sale con densidad $n = n_0 e^{-\mu d}$, donde $\mu = N\sigma$ es el llamado coeficiente de atenuación lineal y N es el número de centros de colisión que el blanco contiene en la unidad de volumen.

En un experimento de dispersión normalmente se cuentan las partículas dispersadas dentro del ángulo sólido $d\Omega$ definido por la ventana del detector y colocado en una dirección predeterminada. Si, como es usual, la sección de dispersión $\sigma = \int \sigma' d\Omega$ se escribe en la forma $\sigma = \pi a^2$, es decir, como un área efectiva alrededor del blanco con radio efectivo de dispersión igual a a, las partículas incidentes que se acerquen al blanco con un parámetro de impacto $b \leq a$ resultarán dispersadas un ángulo $\geq \theta$ y, por lo tanto, no serán registradas por un detector colocado a ese ángulo con respecto a la dirección de incidencia.

Consideremos que el blanco está constituido por una lámina homogénea de área A y espesor δz tan pequeño que la sección individual de dispersión σ de las partículas que lo constituyen no se translapan, es decir, que una partícula proyectil al cruzar este blanco experimenta sólo una dispersión. Si la lámina contiene N centros de dispersión por unidad de volumen, tendrá un total de $NA\delta z$ dispersores, y el área efectiva que presenta para dispersión a ángulos $\geq \theta$ es

$$A_{\text{ef}} = \sigma N A \delta z. \tag{XX.49}$$

Como se supone que el área total del blanco A es iluminada uniformemente por el haz incidente, la fracción de partículas incidentes que experimentan dispersión a ángulos $\geq \theta$ respecto del total es

$$\frac{\text{Número de partículas dispersadas a ángulos} \geq \theta}{\text{Número de partículas incidentes sobre el blanco}} \equiv f = \frac{\sigma N A \delta z}{A} = \sigma N \delta z. \tag{XX.50}$$

Supongamos ahora que el blanco es una lámina de espesor d finito, de tal forma que los proyectiles que la cruzan pueden experimentar varias dispersiones antes de emerger del blanco. Para determinar el número de proyectiles que emergen imaginamos la lámina de espesor finito como una sucesión de laminillas de grosor dz tan pequeño que se les puede aplicar la fórmula (XX.50). Cada colisión que ocurre entre z y $z + dz$ remueve un proyectil del haz incidente y produce un decrecimiento del número de partículas n_0 que inciden en las láminas que siguen. Denotando este decrecimiento con $dn_0(z)$ y aplicando (XX.50), se obtiene

$$\frac{dn_0\,(z)}{n_0\,(z)} = -\sigma N\,dz. \tag{XX.51}$$

Integrando sobre todo el espesor de la lámina, se obtiene para la densidad del haz que sale del blanco

$$n = n_0 e^{-\sigma N d} = n_0 e^{-\mu d}, \tag{XX.52}$$

donde se introdujo la cantidad $\mu = N\sigma$, apropiadamente llamada *coeficiente de atenuación lineal*. Vemos que la atenuación del haz aumenta exponencialmente con el espesor del blanco.

XX.7 Demuestre que la sección diferencial de dispersión en la aproximación de Born debida a una barrera esférica de radio R y altura constante V_0 es

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \frac{(\operatorname{sen} qR - qR\cos qR)^2}{q^6}.$$

En la aproximación de Born, la amplitud de dispersión está dada por la ecuación (T20.21)

$$f\,(\theta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V\,(\mathbf{r})\; e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\,d^3r. \tag{XX.53}$$

A su vez, la sección diferencial de dispersión está dada en general por la expresión (T20.12)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f\,(\theta,\varphi)|^2\,. \tag{XX.54}$$

Consideremos una barrera esférica uniforme; el correspondiente potencial lo podemos escribir en la forma

$$V\,(\mathbf{r}) = \begin{cases} V_0, & r \le R; \\ 0, & r > R. \end{cases} \tag{XX.55}$$

De (XX.53) sigue para la correspondiente amplitud de dispersión

$$f\,(\theta,\varphi) = -\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2}\int_0^R\int_0^\pi\int_0^{2\pi} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} r^2 \operatorname{sen}\theta\,d\varphi\,d\theta\,dr. \tag{XX.56}$$

La integral

$$I = \int_0^\pi\int_0^{2\pi} e^{iqr\cos\theta}\operatorname{sen}\theta d\varphi d\theta \tag{XX.57}$$

es común a todos los potenciales centrales y se realiza fácilmente si se orienta el eje Oz del sistema de referencia en la dirección del vector $\mathbf{q}$ y se hace el cambio de variable $x = \cos\theta$, lo que conduce a

$$\begin{aligned} I &= 2\pi\int_0^\pi e^{iqr\cos\theta}\operatorname{sen}\theta d\theta = 2\pi\int_{-1}^1 e^{iqrx}dx \\ &= 2\pi\frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr} = \frac{4\pi\operatorname{sen} qr}{qr}. \end{aligned} \tag{XX.58}$$

Con este resultado en (XX.53) se obtiene la fórmula para la amplitud de dispersión por potenciales centrales (T20.31), es decir,

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})\, e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\, d^3r = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty rV(r)\,\text{sen}\; qrdr. \qquad \text{(XX.59)}$$

Insertando aquí el potencial (XX.55) o, alternativamente, sustituyendo en (XX.56), se llega a una integral que se realiza fácilmente por partes:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\int_0^R r\,\text{sen}\, qrdr \\ &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\left[-\frac{r}{q}\cos qr\Big|_0^R + \frac{1}{q}\int_0^R \cos qrdr\right] \\ &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\left(-\frac{R}{q}\cos qR + \frac{1}{q^2}\,\text{sen}\, qR\right), \end{aligned} \qquad \text{(XX.60)}$$

o sea

$$f(\theta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\cdot\frac{\text{sen}\, qR - qR\cos qR}{q^3}, \qquad \text{(XX.61)}$$

en donde la dependencia en el ángulo de dispersión (y de la energía de colisión) se da a través del momento transferido $q = 2k\,\text{sen}\,\frac{1}{2}\theta$, $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

Substituyendo este resultado en (XX.54) obtenemos la sección diferencial de dispersión para una barrera esférica homogénea de radio R y altura constante V_0 en la primera aproximación de Born:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \frac{(\text{sen}\, qR - qR\cos qR)^2}{q^6}. \qquad \text{(XX.62)}$$

XX.8 Para que se produzca el efecto Ramsauer-Townsend (véase la sección 6.2 del texto) se requiere que la sección eficaz se anule a energías de bombardeo muy pequeñas (que se pueden tomar como cero). Tomando como modelo del potencial de interacción un pozo esférico uniforme, determine qué valor debe asignarse al producto a^2V_0. *Observación*: considere al menos las ondas s y p.

Este problema se estudia parcialmente, pero en detalle, en la sección 13.7 del texto; sin embargo por completez lo analizamos aquí, primero en forma general, para reducirnos posteriormente al caso de bajas energías (onda s). El pozo esférico uniforme tiene la forma

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} -V_0, & r \le a \\ 0, & r > a \end{cases}, \quad V_0 > 0. \qquad \text{(XX.63)}$$

Para analizar el problema en términos de ondas parciales partimos de la ecuación radial de Schrödinger para una componente de momento angular l bien definido, ecuación (T13.20),

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2mr}\frac{dR}{dr} + \left[-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - V(r) + E\right]R = 0, \qquad \text{(XX.64)}$$

de la cual nos interesan las soluciones para $E > 0$. Con el cambio de variable

$$\rho \equiv \rho_< = k_1 r, \quad k_1 = \sqrt{2m(V_0 + E)}/\hbar \qquad \text{(XX.65)}$$

para la región interior y

$$\rho_> = kr, \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar \tag{XX.66}$$

en la región exterior, la ecuación de Schrödinger (XX.64) se reescribe en la forma

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] R = 0, \quad r \leq a, \tag{XX.67}$$

$$\frac{d^2R}{d\rho_>^2} + \frac{2}{\rho_>}\frac{dR}{d\rho_>} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho_>^2}\right] R = 0, \quad r > a. \tag{XX.68}$$

Ambas ecuaciones tienen como soluciones regulares las funciones esféricas de Bessel $j_l(\rho)$; las otras soluciones linealmente independientes son las funciones esféricas de Neumann $n_l(\rho)$.[2] La solución en el interior ($r \leq a$) debe ser regular en el origen; esto elimina las funciones de Neumann, y debemos escribir

$$R(r) = Aj_l(k_1 r), \quad r \leq a, \tag{XX.69}$$

con A una constante, que podemos ajustar para normalizar la función de onda. La solución para el exterior ($r > a$) tiene la forma general

$$R(r) = Bj_l(kr) + Cn_l(kr), \quad r > a. \tag{XX.70}$$

El cociente B/C se determina a partir de la condición de continuidad de la derivada logarítmica de R en $r = a$ (la prima denota derivación respecto del propio argumento en cada caso),

$$k_1 \frac{j_l'(k_1 r)}{j_l(k_1 r)}\bigg|_{r=a} = k \frac{Bj_l'(kr) + Cn_l'(kr)}{Bj_l(kr) + Cn_l(kr)}\bigg|_{r=a}. \tag{XX.71}$$

Si escribimos

$$B = \alpha_l \cos\delta_l, \quad C = -\alpha_l \operatorname{sen}\delta_l, \tag{XX.72}$$

la condición (XX.71) —lo que equivale a decir, el potencial dispersor— determina los desfasamientos δ_l, mientras que el coeficiente α_l queda determinado por A, es decir, por la continuidad de la amplitud. Con esta nueva parametrización la ecuación (XX.71) toma la forma

$$k_1 \frac{j_l'(k_1 a)}{j_l(k_1 a)} = k \frac{j_l'(ka)\cos\delta_l - n_l'(ka)\operatorname{sen}\delta_l}{j_l(ka)\cos\delta_l - n_l(ka)\operatorname{sen}\delta_l} \tag{XX.73}$$

$$= k \frac{j_l'(ka) - n_l'(ka)\tan\delta_l}{j_l(ka) - n_l(ka)\tan\delta_l}, \tag{XX.74}$$

de donde sigue

$$\tan\delta_l = \frac{kj_l(k_1 a)\, j_l'(ka) - k_1 j_l(ka)\, j_l'(k_1 a)}{kj_l(k_1 a)\, n_l'(ka) - k_1 n_l(ka)\, j_l'(k_1 a)}. \tag{XX.75}$$

La expresión (XX.75) se simplifica considerablemente para valores bajos de l, pues en tal caso pueden usarse con utilidad las expresiones de las funciones

[2] Algunas propiedades de las funciones esféricas de Bessel se revisan en el apéndice matemático, subsección A.6.9, así como en el apéndice A.6 del texto.

esféricas de Bessel en términos de funciones trigonométricas. Por ejemplo las fórmulas

$$j_0(z) = \frac{\operatorname{sen} z}{z}, \quad j_1(z) = \frac{\operatorname{sen} z}{z^2} - \frac{\cos z}{z} = -j_0'(z); \tag{XX.76}$$

$$n_0(z) = -\frac{\cos z}{z}, \quad n_1(z) = -\frac{\operatorname{sen} z}{z} - \frac{\cos z}{z^2} = -n_0'(z), \tag{XX.77}$$

sustituidas en (XX.75) con $l = 0$, dan la siguiente expresión (exacta) para el desfasamiento de la onda s:

$$\tan \delta_0 = \frac{k}{k_1} \frac{\tan k_1 a - (k_1/k) \tan ka}{1 + (k/k_1) \tan ka \tan k_1 a}. \tag{XX.78}$$

A su vez, la solución (XX.70), tomando en cuenta (XX.72), se reduce para la onda s a

$$R = \frac{\alpha_0}{ka} \left(\operatorname{sen} ka \cos \delta_0 + \cos ka \operatorname{sen} \delta_0 \right), \tag{XX.79}$$

es decir,

$$R = \frac{\alpha_0}{ka} \operatorname{sen} \left(ka + \delta_0 \right). \tag{XX.80}$$

Como en ausencia del potencial dispersor debe tomarse $k_1 = k$, de (XX.69) y (XX.70) sigue que $C = 0$ y (XX.72) da $\delta_0 = 0$. Esto muestra que δ_0 juega el papel de un desfasamiento de la onda s generado por la presencia del potencial dispersor.

A energías suficientemente bajas se cumple que $ka \ll 1$, y es posible simplificar considerablemente la ecuación (XX.75). Utilizando las expresiones asintóticas de las funciones de Bessel, expresiones (T20.79),

$$j_l(z) \sim \frac{z^l}{(2l+1)!!}, \quad j_l'(z) \sim \frac{l z^{l-1}}{(2l+1)!!} = \frac{l}{z} j_l(z), \tag{XX.81}$$

$$n_l(z) \sim -\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}}, \quad n_l'(z) \sim \frac{(2l-1)!!\,(l+1)}{z^{l+2}} = -\frac{l+1}{z} n_l(z), \tag{XX.82}$$

sustituyendo y simplificando se llega a la ecuación (T20.106), es decir,

$$\tan \delta_l = \frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!\,(2l-1)!!} \cdot \frac{l j_l(k_1 a) - k_1 a j_l'(k_1 a)}{(l+1)\, j_l(k_1 a) + k_1 a j_l'(k_1 a)}. \tag{XX.83}$$

El factor $(ka)^{2l+1}$ al frente de esta expresión implica que $\tan \delta_l$ decrece conforme la energía se reduce, y que lo hace más rápidamente conforme el valor de l aumenta. Esto significa, en particular, que a la sección total de dispersión a bajas energías sólo contribuyen de forma importante los primeros valores de l, es decir, la onda s y la onda p; los demás términos pueden ser ignorados (este tema se discute con detalle en la sección 20.5 del texto).

Para el caso $l = 0$, la expresión (XX.83) da

$$\begin{aligned} \tan \delta_0 &= ka \cdot \frac{-k_1 a j_0'(k_1 a)}{j_0(k_1 a) + k_1 a j_0'(k_1 a)} \\ &= \frac{k}{k_1} \frac{\operatorname{sen} k_1 a - k_1 a \cos k_1 a}{\cos k_1 a} = -ka \left(1 - \frac{\tan k_1 a}{k_1 a} \right), \end{aligned}$$

o bien,

$$\tan \delta_0 = -ka + \frac{k}{k_1} \tan k_1 a. \tag{XX.84}$$

Naturalmente, este mismo resultado se obtiene aproximando (XX.78) a primer orden en ka:

$$\begin{aligned}\tan\delta_0 &= \frac{k}{k_1}\frac{\tan k_1a-(k_1/k)\tan ka}{1+(k/k_1)\tan ka\tan k_1a}\\ &\approx \frac{k}{k_1}\frac{\tan k_1a-(k_1/k)ka}{1+(ka/k_1a)ka\tan k_1a}\approx\frac{k}{k_1}\left[\tan k_1a-(k_1/k)ka\right].\end{aligned}$$

Para la onda p, es decir $l=1$, se obtiene

$$\tan\delta_1=\frac{(ka)^3}{3}\frac{j_1(k_1a)-k_1aj_1'(k_1a)}{2j_1(k_1a)+k_1aj_1'(k_1a)} \tag{XX.85}$$

o bien, usando (XX.81),

$$\tan\delta_1=ka\left[\left(\frac{k}{k_1}\right)^2-\tfrac{1}{3}(ka)^2\right]-\frac{(ka)^3}{3k_1a}\cot k_1a. \tag{XX.86}$$

La sección eficaz total está dada por la ecuación (T20.66)

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,\mathrm{sen}^2\,\delta_l. \tag{XX.87}$$

Suponiendo que la energía es suficientemente baja para que basten las ondas s y p para el cálculo de la sección total, se obtiene

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\left(\mathrm{sen}^2\,\delta_0+3\,\mathrm{sen}^2\,\delta_1\right). \tag{XX.88}$$

Vemos que esta sección será pequeña sólo si cada una de las dos contribuciones es a su vez pequeña. Como δ_1 es de tercer orden en ka, mientras que δ_0 es de primer orden, según sigue de (XX.83), para bajas energías con $ka\ll 1$ podemos hacer la aproximación $\mathrm{sen}\,\delta_j\sim\tan\delta_j\sim\delta_j$, y escribir

$$\sigma=4\pi a^2\left(\frac{1}{k_1a}\tan k_1a-1\right)^2+4\pi a^2\frac{(ka)^4}{9}\left[\frac{3}{(k_1a)^2}-\frac{1}{k_1a}\cot k_1a-1\right]^2, \tag{XX.89}$$

lo que da para la onda s

$$\sigma=4\pi a^2\left(\frac{1}{k_1a}\tan k_1a-1\right)^2. \tag{XX.90}$$

Esta sección se anula cada vez que

$$k_1a=\tan k_1a, \tag{XX.91}$$

donde $k_1=\sqrt{2m(V_0+E)}/\hbar\approx\sqrt{2mV_0}/\hbar$ (para escribir la última igualdad se ha supuesto que la energía es muy baja y puede despreciarse frente a V_0). Las raíces de esta ecuación determinan los valores de a^2V_0 que anulan la sección eficaz de onda s, produciéndose así el efecto Ramsauer-Townsend. Los primeros valores son

$$\sqrt{2ma^2V_0}/\hbar=4.493,\ 7.725,\ 10.904, 14.066,\ldots \tag{XX.92}$$

Por otra parte, una expresión asintótica para las raíces de la ecuación $\tan x-x=0$ es

$$x^{(n)}\sim\frac{\pi}{2}\left(2n+1-\frac{1}{2n+1}+\cdots\right). \tag{XX.93}$$

XX.9 Suponga que la interacción entre un neutrón y un protón fuera la misma en el estado del singulete que en el estado del triplete y que, además, pudiera modelarse como un pozo esférico uniforme. ¿Para qué valores del ancho del pozo serían correctamente predichas por este modelo la energía del estado base del deuterón y la sección de dispersión de neutrones lentos por protones? *Observación*: la sección experimental de dispersión de neutrones lentos por hidrógeno es aproximadamente de 20.4 barns.

Como se supone la misma interacción para el triplete y el singulete, el potencial no depende del espín de los nucleones y puede modelarse con la expresión (XX.63) usada en el problema anterior. Es importante señalar que esta suposición es poco realista, pues a muy bajas energías la sección eficaz total en el estado singulete es un orden de magnitud mayor que en el estado triplete; en otras palabras, las fuerzas nucleares tienen una componente de interacción espín-espín significativa. Por lo tanto, los resultados numéricos del presente problema deben tomarse meramente como indicativos. En el problema XX.29 se da un ejemplo más realista de interacción neutrón-protón, tomando en cuenta los efectos del espín de estas partículas.

En la sección 13.6 del texto se hace un estudio elemental del deuterón, modelado precisamente con un potencial esférico cuadrado; ahí se demuestra que el estado base corresponde a $k_1 a \approx \pi/2$ (ecuación (T13.102)) y que para este estado se cumple que $|E| \ll V_0$. En el problema XIII.24 se hace ver que éste es el único estado ligado, pues el primer estado excitado predicho por el modelo cae en el continuo. Como se trata de una mera estimación del orden de magnitud de los parámetros, se puede tomar $E \approx 0$ sin cometer un error grave, con lo que se puede poner $k \approx k_1$. Por otro lado, en la sección 20.6 del texto se muestra que las resonancias para el potencial en cuestión ocurren cuando se cumple la ecuación (T20.109)

$$k_1 a - \frac{\pi}{2} l \approx \pi \left(n + \tfrac{1}{2}\right). \tag{XX.94}$$

Tomando aquí $l = 0$, $n = 0$, como corresponde al deuterio en su estado base, se recupera la expresión $k_1 a \approx \pi/2$, por lo que ambas situaciones ocurren simultáneamente.

Debemos aún verificar que la sección eficaz total predicha por el modelo sea razonable. De la ecuación (T20.66) vemos que cuando la onda s es dominante, la sección eficaz toma la forma

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \operatorname{sen}^2 \delta_0. \tag{XX.95}$$

En la resonancia $\operatorname{sen} \delta_0 = 1$ y la sección total se reduce a (cf. (T20.104))

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} = \frac{4\pi}{(ka)^2} a^2 = \frac{16}{\pi} a^2 \Rightarrow a = \frac{\sqrt{\pi\sigma}}{4}. \tag{XX.96}$$

Substituyendo $\sigma \approx 20$ barn $= 20 \times 10^{-24}$ cm^2, se obtiene $a \approx 2 \times 10^{-12}$ cm; este valor difiere, pero no esencialmente, del utilizado en el texto como radio aproximado del deuterón. El modelo es obviamente pobre, pero no irrazonable.

XX.10 Calcule la sección diferencial elástica para el caso en que tanto el blanco como el proyectil poseen estructura.

Para ser más específicos consideraremos el caso eléctrico y supondremos que el blanco es una carga eléctrica extensa con densidad $e\rho(\mathbf{r})$ $\left(\int \rho(\mathbf{r})d^3r = 1\right)$; a su vez, el proyectil, también con carga extensa, posee la densidad $e'\rho'(\mathbf{r})$ $\left(\int \rho'(\mathbf{r})d^3r = 1\right)$. La interacción entre ambas cargas es coulombiana. Denotando con $\mathbf{r}$ la posición del centro de masa del proyectil, con $\mathbf{r}'$ la posición de cada uno de los elementos de carga que constituyen el proyectil respecto a su centro de masa y con $\mathbf{r}''$ la posición de los elementos de carga de la partícula blanco, el potencial de interacción entre el blanco y el proyectil es

$$V(\mathbf{r}) = ee' \int\int \frac{\rho(\mathbf{r}')\,\rho'(\mathbf{r}'')}{|\mathbf{r}+\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|} d^3r'\, d^3r'', \tag{XX.97}$$

donde las integrales se extienden sobre el volumen ocupado por las partículas. Sustituyendo esta expresión en la ecuación (XX.53) se obtiene para la amplitud de dispersión de partículas extensas en la primera aproximación de Born

$$f(\theta) = -\frac{mee'}{2\pi\hbar^2} \int\int\int \frac{\rho(\mathbf{r}')\,\rho(\mathbf{r}'')}{|\mathbf{r}+\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|}\, e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\; d^3r\; d^3r'\; d^3r''. \tag{XX.98}$$

Con el cambio de variable $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R} = \mathbf{r}+\mathbf{r}'-\mathbf{r}''$ el integrando se factoriza de manera muy conveniente,

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{mee'}{2\pi\hbar^2} \int\int\int \frac{\rho(\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}'')}{|\mathbf{R}|}\, e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{r}'+\mathbf{r}'')}\; d^3R\, d^3r'\; d^3r'' \\ &= -\frac{mee'}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}}{R}\, d^3R \int \rho(\mathbf{r}')\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}\; d^3r' \int \rho(\mathbf{r}'') e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}''}\; d^3r''. \end{aligned} \tag{XX.99}$$

La segunda y la tercera integral son proporcionales a la transformada de Fourier de las distribuciones de carga del blanco y del proyectil, respectivamente, es decir, los correspondientes *factores de forma eléctricos*:

$$F(\mathbf{q}) = \int \rho(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} d^3r', \tag{XX.100}$$

$$G(\mathbf{q}) = \int \rho'(\mathbf{r}'') e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}''}\, d^3r''. \tag{XX.101}$$

Cuando las distribuciones de carga poseen simetría esférica, los factores de forma pasan a depender sólo de la magnitud de $\mathbf{q}$. Suponiendo que éste es el caso, la amplitud de dispersión resulta (cambiando el nombre de la variable de integración, $\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{r}$)

$$f(\theta) = -\frac{mee'}{2\pi\hbar^2} F\left(q^2\right) G\left(q^2\right) \int \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{|\mathbf{r}|} d^3r. \tag{XX.102}$$

Identificando aquí la cantidad $V(r) = ee'/r$ con el potencial de interacción entre dos cargas e y e' tomadas como puntuales, el resultado anterior se puede reescribir en la forma

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} F\left(q^2\right) G\left(q^2\right) \int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r, \tag{XX.103}$$

o mejor,

$$f(\theta) = F\left(q^2\right) G\left(q^2\right) f_{\text{puntual}}(\theta,\varphi). \tag{XX.104}$$

Es claro que este resultado es general, en el sentido de que proporciona la relación que existe entre la amplitud puntual de dispersión y la correspondiente amplitud para el problema con estructura. De aquí sigue que la sección diferencial de dispersión de partículas con estructura es

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\text{extensa}} = \left|F\left(q^2\right)\right|^2 \left|G\left(q^2\right)\right|^2 \left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\text{puntual}}. \tag{XX.105}$$

XX.11 Protones con energía de 0.3 MeV son dispersados por una hoja delgada de aluminio. Se observa que el número de protones dispersados hacia atrás es 0.96 veces el valor predicho para un potencial coulombiano. Interpretando esta discrepancia como debida a los efectos de blindaje y suponiendo que la correspondiente modificación del potencial afecta sensiblemente sólo a la onda s, determine el cambio en el valor de δ_0. Especifique si se trata de una interacción atractiva o repulsiva.

El efecto de blindaje ocasiona un cambio $\Delta\delta_l$ en los corrimientos de fase debidos al potencial coulombiano. Esto modifica la amplitud de dispersión, que en vez de estar dada por la ecuación (T20.63)

$$f\left(\theta\right) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)\left(e^{2i\delta_l}-1\right)P_l\left(\cos\theta\right), \tag{XX.106}$$

se transforma en

$$f\left(\theta\right) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)\left(e^{2i(\delta_l+\Delta\delta_l)}-1\right)P_l\left(\cos\theta\right). \tag{XX.107}$$

El factor $e^{2i(\delta_l+\Delta\delta_l)}-1$ puede ser reescrito de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} e^{2i(\delta_l+\Delta\delta_l)}-1 &= e^{2i\delta_l}e^{2i\Delta\delta_l}-1+e^{2i\delta_l}-e^{2i\delta_l} \\ &= \left(e^{2i\delta_l}-1\right)+e^{2i\delta_l}\left(e^{2i\Delta\delta_l}-1\right) \\ &= \left(e^{2i\delta_l}-1\right)+e^{i(2\delta_l+\Delta\delta_l)}\left(e^{i\Delta\delta_l}-e^{-i\Delta\delta_l}\right) \\ &= \left(e^{2i\delta_l}-1\right)+2ie^{i(2\delta_l+\Delta\delta_l)}\operatorname{sen}\Delta\delta_l, \end{aligned} \tag{XX.108}$$

lo que permite reescribir (XX.107) en la forma

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i\delta_l}-1\right)P_l(\cos\theta) \\ &\quad +\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i(2\delta_l+\Delta\delta_l)}\operatorname{sen}\Delta\delta_l P_l(\cos\theta). \end{aligned} \tag{XX.109}$$

El primer término del lado derecho corresponde a la amplitud de dispersión producida por el potencial coulombiano (o cualquier otro que pueda ser tratado en forma similar); denotando esta amplitud con $f_c(\theta)$, se puede escribir

$$f\left(\theta\right) = f_c\left(\theta\right) + \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)e^{i(2\delta_l+\Delta\delta_l)}\operatorname{sen}\Delta\delta_l P_l\left(\cos\theta\right). \tag{XX.110}$$

Como por hipótesis el blindaje sólo afecta sensiblemente a la onda s, podemos ignorar las correcciones para $l \geq 1$ y escribir

$$f(\theta) = f_c(\theta) + \frac{1}{k} e^{i(2\delta_0 + \Delta\delta_0)} \operatorname{sen} \Delta\delta_0. \tag{XX.111}$$

Insertando este resultado en la fórmula general para la sección diferencial

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2,$$

y poniendo $\theta = \pi$, obtenemos para la sección eficaz hacia atrás:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=\pi} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=\pi}^{\text{Ruther}} + \frac{1}{k^2} \operatorname{sen}^2 \Delta\delta_0 + 2\text{Re}\left[\frac{1}{k} f_c(\pi)\, e^{-i(2\delta_0 + \Delta\delta_0)} \operatorname{sen} \Delta\delta_0\right]. \tag{XX.112}$$

En la aproximación de onda s, podemos escribir

$$f_c(\pi) = -\left[\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=\pi}^{\text{Ruther}}\right]^{1/2} e^{2i\delta_0}, \tag{XX.113}$$

con lo que obtenemos

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=\pi} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=\pi}^{\text{Ruther}} + \frac{1}{k^2} \operatorname{sen}^2 \Delta\delta_0 - \frac{1}{k}\left[\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=\pi}^{\text{Ruther}}\right]^{1/2} \operatorname{sen} 2\Delta\delta_0. \tag{XX.114}$$

De los valores numéricos $m_p = 1.67 \times 10^{-27}\text{kg}$, $E = 0.3$ MeV$= 4.806 \times 10^{-14}$ J, sigue que

$$\begin{aligned} \frac{1}{k^2} &= \frac{\hbar^2}{2mE} = \frac{\left(1.054 \times 10^{-34}\ \text{J}\cdot\text{s}\right)^2}{2\left(1.67 \times 10^{-27}\text{kg}\right)\left(4.806 \times 10^{-14}\ \text{J}\right)} \\ &= 6.921 \times 10^{-29}\ \text{m}^2 = 0.692\ \text{barn}, \qquad \text{(XX.115)} \\ \frac{1}{k} &= 8.319 \times 10^{-15}\ \text{m}. \qquad \text{(XX.116)} \end{aligned}$$

Escribiendo además $e^2 \simeq \hbar c/137 = 2.308 \times 10^{-28}$ J·m, y aproximando la sección diferencial de dispersión de Rutherford con la expresión

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{\text{Ruther}} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E \operatorname{sen}^2(\theta/2)}\right]^2, \tag{XX.117}$$

se obtiene para $Z_2 = Z_{\text{Al}} = 13$,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=\pi}^{\text{Ruther}} = \left[\frac{13\left(2.308 \times 10^{-28}\,\text{J}\cdot\text{m}\right)}{4\left(4.806 \times 10^{-14}\ \text{J}\right)}\right]^2 = 2.436 \times 10^{-28}\text{m}^2/\text{sr} = 2.436\,\text{barn/sr}. \tag{XX.118}$$

De los datos experimentales sabemos que

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=\pi} = 0.96\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=\pi}^{\text{Ruther}}, \tag{XX.119}$$

de donde

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=\pi} = 2.339 \text{ barn/sr.} \qquad \text{(XX.120)}$$

Sustituyendo (XX.115), (XX.116), (XX.118) y (XX.120) en (XX.114), se obtiene $2.339 \times 10^{-28} = 2.436 \times 10^{-28} + 0.692 \times 10^{-28} \operatorname{sen}^2 \Delta\delta_0 - 1.298 \times 10^{-27} \operatorname{sen} 2\Delta\delta_0$, lo que puede reescribirse como

$$\operatorname{sen} 2\Delta\delta_0 - 0.5331 \operatorname{sen}^2 \Delta\delta_0 - 7.473 \times 10^{-2} = 0. \qquad \text{(XX.121)}$$

Las raíces de esta ecuación en $[0, \pi]$ determinan el valor de $\Delta\delta_0$. Estas raíces son

$$\Delta\delta_0 = 2.2^\circ, \quad \Delta\delta_0 = 72.9^\circ,$$

de las cuales sólo la primera debe ser considerada, pues el valor de δ_0 para el corrimiento de fase coulombiano es muy pequeño. Dado el pequeño valor de $\Delta\delta_0$, es posible aproximar en (XX.121) el seno con el arco, lo que conduce rápidamente a la solución numérica anterior. El desfasamiento positivo indica que se trata de una interacción atractiva.

XX.12 Neutrones con energía de 4 MeV en el sistema CM son dispersados por una hoja fina de núcleos pesados. Se observan los siguientes corrimientos importantes de fase: $\delta_0 = 26.1^\circ$, $\delta_1 = 7.6^\circ$, $\delta_2 = 0.3^\circ$. El flujo incidente es de 10^{11} núcleos/cm$^2 \cdot$ s, y el blanco posee 10^{21} núcleos/cm^2. Use estos datos para determinar:

a) la sección total de dispersión;

b) el número medio de neutrones que inciden cada segundo sobre sendos detectores con apertura de 10^{-5} ster-rad, colocados a 90° y 180° respecto del haz incidente.

Como a la energía de bombardeo considerada los únicos corrimientos de fase significativos son δ_0, δ_1 y δ_2, podemos ignorar los términos con $l \geq 3$ y usar la siguiente expresión aproximada para la amplitud de dispersión (cf. ecuación (XX.106)):

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\left[\left(e^{2i\delta_0} - 1\right) P_0(\cos\theta) + 3\left(e^{2i\delta_1} - 1\right) P_1(\cos\theta) + 5\left(e^{2i\delta_2} - 1\right) P_2(\cos\theta)\right]. \qquad \text{(XX.122)}$$

Introduciendo aquí las expresiones explícitas de los polinomios de Legendre,

$$P_0(\cos\theta) = 1, \quad P_1(\cos\theta) = \cos\theta, \quad P_2(\cos\theta) = \tfrac{3}{2}\cos^2\theta - \tfrac{1}{2},$$

se obtiene

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2ik}\left[\left(e^{2i\delta_0} - 1\right) + 3\left(e^{2i\delta_1} - 1\right)\cos\theta \right. \\ &\quad \left. + \tfrac{5}{2}\left(e^{2i\delta_2} - 1\right)\left(3\cos^2\theta - 1\right)\right] \\ &= \frac{1}{2k}\left[\operatorname{sen} 2\delta_0 + 3\operatorname{sen} 2\delta_1 \cos\theta + \tfrac{5}{2}\operatorname{sen} 2\delta_2 \left(3\cos^2\theta - 1\right)\right] \\ &\quad - \frac{i}{2k}\left[\cos 2\delta_0 - 1 + 3\left(\cos 2\delta_1 - 1\right)\cos\theta \right. \\ &\quad \left. + \tfrac{5}{2}\left(\cos 2\delta_2 - 1\right)\left(3\cos^2\theta - 1\right)\right] \\ &= \frac{1}{2k}\left[\operatorname{sen} 2\delta_0 + 3\operatorname{sen} 2\delta_1 \cos\theta + \tfrac{5}{2}\operatorname{sen} 2\delta_2 \left(3\cos^2\theta - 1\right)\right] \\ &\quad + \frac{i}{2k}\left[2\operatorname{sen}^2\delta_0 + 6\operatorname{sen}^2\delta_1 \cos\theta + 5\operatorname{sen}^2\delta_2 \left(3\cos^2\theta - 1\right)\right]. \qquad \text{(XX.123)} \end{aligned}$$

La sección diferencial de dispersión está dada por

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta)|^2 = \frac{1}{4k^2}\left[\operatorname{sen} 2\delta_0 + 3\operatorname{sen} 2\delta_1 \cos\theta + \tfrac{5}{2}\operatorname{sen} 2\delta_2(3\cos^2\theta - 1)\right]^2 \\ &\quad + \frac{1}{4k^2}\left[2\operatorname{sen}^2\delta_0 + 6\operatorname{sen}^2\delta_1\cos\theta + 5\operatorname{sen}^2\delta_2(3\cos^2\theta - 1)\right]^2. \quad \text{(XX.124)}\end{aligned}$$

Por otro lado, la sección total de dispersión, dada por la ecuación (XX.87), posee sólo tres contribuciones en el presente caso,

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\left[\operatorname{sen}^2\delta_0 + 3\operatorname{sen}^2\delta_1 + 5\operatorname{sen}^2\delta_2\right]. \quad \text{(XX.125)}$$

La masa que interviene en el cálculo de los parámetros es la masa reducida del sistema neutrón-núcleo pesado, que puede aproximarse por la masa del neutrón, $m \sim m_n$. Con esta aproximación tenemos

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2\cdot(1.678\times10^{-27}\ \text{kg})\cdot(4\times10^6)\cdot(1.602\times10^{-19}\ \text{J})}{(1.054\times10^{-34}\ \text{J}\cdot\text{s})^2},$$

$$k^2 = 1.934\times10^{29}\ \text{m}^{-2} = 1.934\times10^{25}\ \text{cm}^{-2}. \quad \text{(XX.126)}$$

Sustituyendo este resultado y los valores de δ_0, δ_1 y δ_2 en (XX.125), se obtiene para la sección eficaz total

$$\sigma = \frac{4\pi}{1.934\times10^{25}\ \text{cm}^{-2}}(\operatorname{sen}^2 26.1^\circ + 3\operatorname{sen}^2 7.6^\circ + 5\operatorname{sen}^2 0.3^\circ),$$

$$\sigma = 1.599\times10^{-25}\ \text{cm}^2 \simeq 0.16\ \text{barn}. \quad \text{(XX.127)}$$

Para determinar el conteo de cada detector, consideramos que si J es el flujo incidente, es decir, el número de partículas que inciden sobre el blanco por cm^2 por segundo, y si el blanco posee N centros dispersores, el número medio de partículas dn' que emergen por segundo en el ángulo sólido $d\Omega$ alrededor del ángulo centrado en θ, φ es

$$dn' = JNd\sigma(\theta) = JN\,|f\,(\theta)|^2\,d\Omega. \quad \text{(XX.128)}$$

El número total de partículas dispersadas en un segundo se obtiene integrando esta expresión sobre todo el ángulo sólido. Tomando en cuenta que el haz incidente tiene un área transversal de 1 cm^2, que el número de partículas blanco es $N = 10^{21}$ y que el flujo es de $J = 10^{11}$ neutrones/cm^2·s, se obtiene

$$N' = NJ\sigma = 1.599\times10^7\ \text{neutrones/s}. \quad \text{(XX.129)}$$

Por otra parte, de (XX.124) se tiene que

$$\begin{aligned}|f(90^\circ)|^2 &= \frac{1}{4\times1.934\times10^{25}\ \text{cm}^{-2}} \\ &\quad\times\left[(\operatorname{sen}52.2^\circ - 2.5\operatorname{sen}0.6^\circ)^2 + (2\operatorname{sen}^2 26.1^\circ - 5\operatorname{sen}^2 0.3^\circ)^2\right] \\ &= 9.481\times10^{-27}\ \text{cm}^2/\text{sr} = 9.481\ \text{mbarn/sr}. \quad \text{(XX.130)}\end{aligned}$$

Con estos valores, el número medio de partículas que inciden cada segundo sobre un detector de apertura $\delta\Omega = 1\times10^{-5}$ ster-rad a 90°, respecto a la dirección del haz, de acuerdo con (XX.128), es

$$\delta N' = \left(1\times10^{32}\right)\cdot\left(9.481\times10^{-27}\right)\cdot\left(1\times10^{-5}\right) = 9.48 \sim 9\,\text{neutrones/s}. \quad \text{(XX.131)}$$

El cálculo a 180° con respecto a la dirección de incidencia es análogo y da

$$\begin{aligned}|f(180^\circ)|^2 &= \frac{1}{4\times 1.934\times 10^{25}\mathrm{cm}^{-2}}\left[(\operatorname{sen}52.2^\circ - 3\operatorname{sen}15.2^\circ + 5\operatorname{sen}0.6^\circ)^2\right.\\ &\quad \left.+ (2\operatorname{sen}^2 26.1^\circ - 6\operatorname{sen}^2 7.6^\circ + 10\operatorname{sen}^2 0.3^\circ)^2\right]\\ &= 1.071\times 10^{-27}\mathrm{cm}^2/\mathrm{sr} = 1.071\ \text{mbarn/sr},\end{aligned}$$

con lo que resulta

$$\delta N' = \left(1\times 10^{32}\right)\cdot\left(1.071\times 10^{-27}\right)\cdot\left(1\times 10^{-5}\right)\sim 1\ \text{neutrón/s}.$$

XX.13 Demuestre que la condición que determina los estados ligados en un pozo esférico uniforme de radio a y profundidad (grande) V_0 es

$$k_1 a = \left(n + \frac{l+1}{2}\right)\pi,$$

donde $k_1^2 = 2m(E+V_0)/\hbar^2$.

Consideremos el pozo de potencial esférico atractivo definido por la ecuación (XX.63); la ecuación radial de Schrödinger es

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2m}{\hbar^2}(V_0+E)R = 0, \quad r\le a, \qquad \text{(XX.132)}$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2m}{\hbar^2}ER = 0, \quad r > a. \qquad \text{(XX.133)}$$

Nos interesan sólo las soluciones para $E<0$, dado que buscamos estados ligados. Definiendo las constantes

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0 - |E|\right), \quad \alpha^2 = \frac{2m\,|E|}{\hbar^2}, \qquad \text{(XX.134)}$$

podemos escribir

$$\frac{d^2R}{d(k_1r)^2} + \frac{2}{k_1r}\frac{dR}{d(k_1r)} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{k_1^2r^2}\right]R = 0, \quad r\le a, \qquad \text{(XX.135)}$$

$$\frac{d^2R}{d(i\alpha r)^2} + \frac{2}{i\alpha r}\frac{dR}{d(i\alpha r)} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{(i\alpha r)^2}\right]R = 0, \quad r > a. \qquad \text{(XX.136)}$$

Ambas ecuaciones tienen como soluciones las funciones esféricas de Bessel. Para garantizar que se cumplen las condiciones de frontera apropiadas, procedemos como sigue. La solución para $r\le a$ debe ser regular en el origen, lo que elimina las funciones de Neumann y nos deja con

$$R(r) = Aj_l(k_1r), \quad r\le a, \qquad \text{(XX.137)}$$

donde A es la constante de normalización. La solución para $r>a$ debe anularse exponencialmente cuando $r\to\infty$; dado que las funciones esféricas de Hankel de primer orden son las únicas funciones de Bessel que se comportan como e^{iz}, tomamos como solución

$$R(r) = Bh_l^{(1)}(i\alpha r), \quad r > a. \qquad \text{(XX.138)}$$

Con esta selección tenemos que, en efecto, cuando $r \to \infty$, $h_l^{(1)}(i\alpha r) \sim e^{i(i\alpha r)} = e^{-\alpha r}$. Las condiciones de continuidad en $r = a$ conducen a la relación

$$\frac{k_1}{j_l(\rho)} \frac{dj_l(\rho)}{d\rho}\bigg|_{\rho=k_1 a} = \frac{i\alpha}{h_l^{(1)}(\rho)} \frac{dh_l^{(1)}(\rho)}{d\rho}\bigg|_{\rho=i\alpha a}. \tag{XX.139}$$

Esta ecuación determina los posibles estados ligados, pero su solución exacta es inalcanzable en general. Supongamos que el potencial es tan profundo que $k_1 a \gg l$; en este caso podemos utilizar la forma asintótica de las funciones de Bessel

$$j_l(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \cos\left[\rho - \frac{\pi}{2}(l+1)\right], \tag{XX.140}$$

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(\rho) &= j_l(\rho) + i n_l(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \cos\left[\rho - \frac{\pi}{2}(l+1)\right] \\ &\quad + i \frac{1}{\rho} \operatorname{sen}\left[\rho - \frac{\pi}{2}(l+1)\right], \end{aligned} \tag{XX.141}$$

de tal forma que

$$\frac{1}{j_l(\rho)} \frac{dj_l(\rho)}{d\rho} \sim -\frac{1}{\rho} - \tan\left[\rho - \frac{\pi}{2}(l+1)\right], \tag{XX.142}$$

$$\frac{1}{h_l^{(1)}(\rho)} \frac{dh_l^{(1)}(\rho)}{d\rho} \sim -\frac{1}{\rho} + i. \tag{XX.143}$$

Con esto, la ecuación (XX.139) se reduce a

$$-\frac{k_1}{\rho} - k_1 \tan\left[\rho - \frac{\pi}{2}(l+1)\right]\bigg|_{\rho=k_1 a} = -\frac{i\alpha}{\rho} - \alpha\bigg|_{\rho=i\alpha a}, \tag{XX.144}$$

es decir,

$$\tan\left[k_1 a - \frac{\pi}{2}(l+1)\right] = \frac{\alpha}{k_1}. \tag{XX.145}$$

Ésta es la condición que determina la posición de los estados ligados. Para resolverla aproximadamente observemos que $\alpha/k_1 = \sqrt{|E| / (V_0 - |E|)}$ se hace muy pequeño si $|E| \ll V_0$, por lo que la condición $k_1 a \gg l$ implica que la tangente debe tener un valor muy cercano a cero. Por lo tanto, como primera aproximación se puede escribir

$$k_1 a - \frac{\pi}{2}(l+1) \simeq n\pi,$$

o bien,

$$k_1 a = \left(n + \frac{l+1}{2}\right)\pi, \quad V_0 \gg \frac{\hbar^2 l^2}{2m_0 a^2}. \tag{XX.146}$$

Combinando este resultado con (XX.134) se obtienen los valores propios aproximados de la energía:

$$E_{nl} = -V_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}\left(n + \frac{l+1}{2}\right)^2. \tag{XX.147}$$

XX.14 Mediante el método de resolver la ecuación radial de Schrödinger considerando el potencial como una perturbación, derive la fórmula (T20.72) que determina el corrimiento de fase cuando es pequeño:

$$\delta_l = -\frac{\pi m}{\hbar^2}\int_0^\infty rV(r)J^2_{l+1/2}(kr)dr.$$

Observe que con este procedimiento obviamos el uso de la ecuación (T20.71).

Como el problema no perturbado es degenerado, pues las partículas dispersadas tienen todas la misma energía, independientemente de su dirección, debe aplicarse la teoría de perturbaciones para sistemas degenerados, lo que complica el tratamiento. Una forma más simple y directa de proceder es la siguiente. Partimos de la ecuación radial de Schrödinger del problema original

$$\frac{d^2R_l(r)}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right]R_l(r) = 0, \quad R_l(0) = 0 \tag{XX.148}$$

y de la correspondiente ecuación para partícula libre

$$\frac{d^2g_l(r)}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]g_l(r) = 0, \quad g_l(0) = 0. \tag{XX.149}$$

Multiplicando (XX.148) por g_l y (XX.149) por R_l y restando, obtenemos

$$R_l(r)\frac{d^2g_l(r)}{dr^2} - g_l(r)\frac{d^2R_l(r)}{dr^2} = \frac{2m}{\hbar^2}V(r)R_l(r)g_l(r), \tag{XX.150}$$

expresión que al ser integrada en el intervalo $r \in [0, \rho]$ conduce a

$$\left[g_l\frac{dR_l}{dr} - R_l\frac{dg_l}{dr}\right]_{r=\rho} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\rho V(r)\,R_l(r)\,g_l(r)\;dr. \tag{XX.151}$$

La solución radial para partícula libre es de la forma

$$g_l(r) = krj_l(kr), \tag{XX.152}$$

con $j_l(kr)$ la función esférica de Bessel. Como la ecuación (XX.151) es homogénea (bilineal) en las funciones g_l y R_l, los resultados que de ella se derivan son independientes de los coeficientes de normalización de estas funciones y podemos poner éstos iguales a 1, como ya hemos hecho al escribir (XX.152). Puesto que nos interesa la solución asintótica para $\rho \to \infty$, podemos aproximar el lado izquierdo de (XX.151) por su valor asintótico escribiendo

$$g_l(r) = \operatorname{sen}(kr - \tfrac{1}{2}l\pi) \tag{XX.153}$$

y

$$R_l(r) = \operatorname{sen}\left(kr - \tfrac{1}{2}l\pi + \delta_l\right). \tag{XX.154}$$

Con estas sustituciones la ecuación (XX.151) se reduce a

$$k\operatorname{sen}\delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\,R_l(r)\,g_l(r)\;dr. \tag{XX.155}$$

Este resultado es exacto, pero formal, pues la fase buscada δ_l queda expresada en términos de sí misma a través de $R_l(r)$. Para obtener una expresión útil, aunque

aproximada, para δ_l, observemos que la diferencia entre las funciones radiales $R_l(r)$ y $g_l(r)$ se debe a la presencia del potencial dispersor; si consideramos éste como una perturbación, a orden más bajo podemos sustituir a $R_l(r)$ con $g_l(r)$, lo que conduce a

$$\operatorname{sen}\delta_l \approx -\frac{2m}{\hbar^2 k}\int_0^\infty V\left(r\right) g_l^2\left(r\right)\, dr = -\frac{2mk}{\hbar^2}\int_0^\infty V\left(r\right) j_l^2\left(kr\right)\, r^2 dr. \quad \text{(XX.156)}$$

La forma solicitada para δ_l se obtiene de aquí al introducir la relación (TA.73),

$$j_l\left(kr\right) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}\left(kr\right), \quad \text{(XX.157)}$$

y aproximar para desfasamientos pequeños $\operatorname{sen}\delta_l \sim \delta_l$.

XX.15 Demuestre que la condición: flujo de la onda incidente = flujo de la onda saliente, implica que $\left|\hat{S}\right|^2 = 1$.

La condición, flujo de la onda incidente = flujo de la onda saliente, significa que si calculamos el flujo total de partículas a través de una superficie esférica en la región asintótica centrada en el origen de coordenadas, el resultado debe ser cero. Escribimos esta condición en la forma

$$J = \int_\Omega J_r r^2 d\Omega = 0, \quad \text{(XX.158)}$$

con el flujo radial dado por

$$J_r = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial r}\right). \quad \text{(XX.159)}$$

Para efectuar el cálculo partimos de la expresión general para la solución asintótica (T20.59), que escribimos por conveniencia en la forma

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1) i^l \frac{\chi_l(r)}{kr} P_l(\cos\theta). \quad \text{(XX.160)}$$

La función $\chi_l(r)$ se puede expresar en la región asintótica como

$$\chi_l(r) \sim \operatorname{sen}(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l) e^{i\delta_l}, \quad \text{(XX.161)}$$

con δ_l el desfasamiento la onda l. De (XX.160) sigue que

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1) i^l \frac{1}{kr}\left[\frac{d\chi_l(r)}{dr} - \frac{1}{r}\chi_l(r)\right] P_l(\cos\theta). \quad \text{(XX.162)}$$

El segundo término del lado derecho es del orden $O(r^{-2})$, lo cual implica que al multiplicarlo por $r^2\psi^*$ da una contribución del orden $O(r^{-1})$, que al ser integrada sobre una esfera de radio infinito se anula. Para la determinación del flujo basta entonces retener el primer término, por lo que escribimos

$$\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{l'=0}^{\infty}(2l+1)(2l'+1)\frac{i^l(-i)^{l'}}{k^2 r^2}\chi_l^*(r)\frac{d\chi_{l'}(r)}{dr} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) + \cdots; \quad \text{(XX.163)}$$

$$\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial r} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{l'=0}^{\infty}(2l+1)(2l'+1)\frac{i^{l'}(-i)^{l}}{k^2 r^2}\chi_l(r)\frac{d\chi_{l'}^*(r)}{dr} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) + \cdots. \quad \text{(XX.164)}$$

El flujo total resulta

$$\begin{aligned} J &= -\frac{i\hbar}{2m}\int\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial r}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial r}\right)r^2\,\mathrm{sen}\,\theta\,d\theta\,d\varphi \\ &= -\frac{i\hbar}{2mk^2}2\pi\left\{\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{l'=0}^{\infty}\left[(2l+1)(2l'+1)i^l(-i)^{l'}\right]\right. \\ &\quad\left.\times\left[\chi_l^*(r)\frac{d\chi_{l'}(r)}{dr}-(-1)^{l-l'}\chi_l(r)\frac{d\chi_{l'}^*(r)}{dr}\right]\right\} \\ &\quad\times\int_0^{\pi}P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)\,\mathrm{sen}\,\theta\,d\theta. \end{aligned} \tag{XX.165}$$

Con la condición de ortogonalidad de los polinomios de Legendre

$$\int_0^{\pi}P_l\left(\cos\theta\right)P_{l'}\left(\cos\theta\right)\mathrm{sen}\,\theta\,d\theta=\frac{2}{2l+1}\delta_{ll'} \tag{XX.166}$$

el resultado anterior se reduce a

$$J=\frac{2\pi\hbar}{imk^2}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)\left[\chi_l^*\left(r\right)\frac{d\chi_l\left(r\right)}{dr}-\chi_l\left(r\right)\frac{d\chi_l^*\left(r\right)}{dr}\right], \tag{XX.167}$$

expresión que hay que evaluar en $r\to\infty$. De (XX.161) y su derivada, válidas ambas en la región asintótica,

$$\frac{d\chi_l\left(r\right)}{dr}\sim k\cos\left(kr-\frac{\pi}{2}l+\delta_l\right)e^{i\delta_l}, \tag{XX.168}$$

sigue que

$$\begin{aligned} &\chi_l^*(r)\frac{d\chi_l(r)}{dr}-\chi_l(r)\frac{d\chi_l^*(r)}{dr} \\ &= ke^{i(\delta_l-\delta_l^*)}\left[\mathrm{sen}\left(kr-\frac{\pi}{2}l+\delta_l^*\right)\cos\left(kr-\frac{\pi}{2}l+\delta_l\right)\right. \\ &\quad\left.-\mathrm{sen}\left(kr-\frac{\pi}{2}l+\delta_l\right)\cos\left(kr-\frac{\pi}{2}l+\delta_l^*\right)\right], \\ &= -ke^{i(\delta_l-\delta_l^*)}\,\mathrm{sen}(\delta_l-\delta_l^*). \end{aligned} \tag{XX.169}$$

El flujo total sobre la esfera en el infinito resulta de esta manera

$$J=\frac{2\pi i\hbar}{mk}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)e^{i\left(\delta_l-\delta_l^*\right)}\,\mathrm{sen}\left(\delta_l-\delta_l^*\right). \tag{XX.170}$$

La condición $J=0$, ecuación (XX.158), se satisface sólo si $\delta_l=\delta_l^*$, es decir, para desfasamientos reales. Esta condición corresponde a dispersión elástica, pues, como se demuestra en la sección 20.7 del texto, desfasamientos complejos son equivalentes a la introducción de absorción y, como sigue de la presente discusión, implican una matriz S no unitaria. En este caso, de la definición (T20.65) para el elemento l de la matriz de dispersión (elástica),

$$S_l\left(k\right)=e^{2i\delta_l}, \tag{XX.171}$$

sigue que

$$S_l^*\left(k\right)=e^{-2i\delta_l}, \tag{XX.172}$$

y que

$$|S|^2 = 1, \tag{XX.173}$$

que es el resultado solicitado.

Una manera alterna de llegar a la misma conclusión es la siguiente: Escribimos la expresión (XX.160) en la región asintótica en la siguiente forma, con $S_l = e^{2i\delta_l}$:

$$\begin{aligned}\psi(r,\theta) &= \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\frac{e^{i\delta_l}}{kr}\,\mathrm{sen}\left(kr-\tfrac{1}{2}l\pi+\delta_l\right)P_l(\cos\theta)\\ &= \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\frac{1}{2ikr}\left[S_l e^{i(kr-l\pi/2)}-e^{-i(kr-l\pi/2)}\right]P_l(\cos\theta). \quad \text{(XX.174)}\end{aligned}$$

Esta expresión incluye tanto ondas salientes como entrantes, las que pueden identificarse como

$$\psi_l^{\mathrm{en}} = -(2l+1)\frac{i^l}{2i}\frac{e^{-i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}}{kr}P_l(\cos\theta), \tag{XX.175}$$

$$\psi_l^{\mathrm{sal}} = (2l+1)\frac{i^l}{2i}\frac{S_l e^{i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}}{kr}P_l(\cos\theta). \tag{XX.176}$$

Con esta identificación y (XX.159) se obtiene para el flujo radial entrante y saliente

$$|J_{\mathrm{en}}| = \frac{\hbar k}{4m}\frac{(2l+1)^2}{k^2r^2}P_l^2(\cos\theta), \tag{XX.177}$$

$$|J_{\mathrm{sal}}| = \frac{\hbar k}{4m}\frac{(2l+1)^2}{k^2r^2}\left|S_l\right|^2 P_l^2\left(\cos\theta\right). \tag{XX.178}$$

Igual que en la demostración anterior, podemos olvidarnos de los términos que van como r^{-3}, pues en el límite asintótico $r\to\infty$ no contribuyen al flujo total. La condición $|J_{\mathrm{in}}| = |J_{\mathrm{sal}}|$ conduce ahora directamente a (XX.173), $|S_l|^2 = 1$.

XX.16 Demuestre que el flujo J a través de una superficie esférica de radio $r\to\infty$ está dado, en el caso de dispersión elástica, por la expresión

$$J = v\left(\sigma - \frac{4\pi}{k}\mathsf{Im}f(0)\right).$$

De (XX.106) se tiene con $\theta = 0$ y $P_l\left(1\right) = 1$:

$$f\left(0\right) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)\left(e^{2i\delta_l}-1\right). \tag{XX.179}$$

De aquí sigue que

$$\mathrm{Im}f\left(0\right) = \frac{f\left(0\right)-f^*\left(0\right)}{2i} = -\frac{1}{4k}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)\left(e^{2i\delta_l}+e^{-2i\delta_l^*}-2\right). \tag{XX.180}$$

Por otro lado, de la ecuación (XX.87) y de las igualdades

$$\mathrm{sen}^2\,\delta_l = \left|e^{i\delta_l}\,\mathrm{sen}\,\delta_l\right|^2 = \left|\frac{e^{2i\delta_l}-1}{2i}\right|^2, \tag{XX.181}$$

sigue que la sección total de dispersión (elástica) se puede escribir en la forma

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\tfrac{1}{4}\left(e^{2i\delta_l}-1\right)\left(e^{-2i\delta_l^*}-1\right)\\ &= \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i(\delta_l-\delta_l^*)}+1\right)-\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i\delta_l}+e^{-2i\delta_l^*}\right).\end{aligned} \tag{XX.182}$$

Combinando con (XX.180) se obtiene

$$\begin{aligned}\sigma-\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) &= \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i(\delta_l-\delta_l^*)}-1\right)\\ &= \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i(\delta_l-\delta_l^*)}\left(e^{i(\delta_l-\delta_l^*)}-e^{-i(\delta_l-\delta_l^*)}\right)\\ &= \frac{2\pi i}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i(\delta_l-\delta_l^*)}\,\mathrm{sen}(\delta_l-\delta_l^*).\end{aligned} \tag{XX.183}$$

Como la velocidad de las partículas incidentes es $v=\hbar k/m$, es posible escribir este resultado en la forma

$$v\left(\sigma-\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f\left(0\right)\right)=\frac{2\pi i\hbar}{mk}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)e^{i(\delta_l-\delta_l^*)}\,\mathrm{sen}(\delta_l-\delta_l^*). \tag{XX.184}$$

Comparando con (XX.170) se reconoce que el lado derecho de esta expresión representa el flujo integrado sobre la superficie de la esfera en el infinito, por lo que podemos escribir

$$J=v\left(\sigma-\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f\left(0\right)\right), \tag{XX.185}$$

que es el resultado solicitado. Como vimos en el ejercicio anterior, la conservación del flujo implica que $J=0$, observación que conduce directamente al *teorema óptico*,

$$\sigma=\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f\left(0\right). \tag{XX.186}$$

Puesto que para efectuar esta demostración no se ha demandado que los desfasamientos sean reales, el teorema óptico queda demostrado para colisiones tanto elásticas como inelásticas.

Una aplicación ilustrativa del teorema óptico es la siguiente: Como de (XX.54) sigue que

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=0}=\left|f\left(0\right)\right|^2, \tag{XX.187}$$

tomando en cuenta que

$$\left|f\left(0\right)\right|^2\geq\left|\mathrm{Im}f\left(0\right)\right|^2$$

sigue de inmediato de (XX.186) que

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=0}\geq\left(\frac{k}{4\pi}\right)^2\sigma_{\mathrm{total}}^2. \tag{XX.188}$$

XX.17 En el caso de dispersión inelástica el flujo J, que es diferente de cero, está dado por $J = -v\sigma_{\text{inel}}$. Demuestre que en este caso el teorema óptico toma la forma dada por la ecuación (T20.114), es decir, $\sigma = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{inel}} = (4\pi/k)\text{Im}f(0)$.

Aceptando por el momento la expresión

$$J = -v\sigma_{\text{inel}}, \tag{XX.189}$$

al sustituirla en (XX.185) se obtiene

$$-v\sigma_{\text{inel}} = v\sigma_{\text{el}} - \frac{4\pi v}{k}\text{Im}f\left(0\right), \tag{XX.190}$$

de donde se recupera el teorema óptico,

$$\sigma_t \equiv \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{inel}} = \frac{4\pi}{k}\,\text{Im}\,f\left(0\right). \tag{XX.191}$$

Éste es precisamente el resultado anterior, ecuación (XX.205).

Sin embargo, dada la importancia de la fórmula, es conveniente llegar a ella con mayor detalle. En la sección 20.7 del texto se muestra que la sección elástica, definida mediante el flujo dispersado, se puede escribir en la forma (T20.111)

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)\left|1 - S_l\right|^2, \tag{XX.192}$$

y la sección inelástica como (cf. ecuación (T20.112))

$$\sigma_{\text{inel}} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)\left(1 - \left|S_l\right|^2\right). \tag{XX.193}$$

La sección total es la suma de las secciones elástica e inelástica, lo que da

$$\begin{aligned}\sigma_t &= \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(\left|1-S_l\right|^2 + 1 - \left|S_l\right|^2\right)\\ &= \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[2 - (S_l + S_l^*)\right],\end{aligned} \tag{XX.194}$$

es decir,

$$\sigma_t = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)\left[1 - \text{Re}S_l\right]. \tag{XX.195}$$

Como ahora los desfasamientos pueden ser complejos, escribimos

$$S_l = e^{2i(\delta_l + i\beta_l)} = e^{-2\beta_l}e^{2i\delta_l} \equiv \eta_l e^{2i\delta_l}, \tag{XX.196}$$

donde tanto η_l como δ_l son parámetros reales, con $0 \leq \eta_l \leq 1$. Con esta notación se obtiene la expresión general para la sección eficaz total

$$\sigma_t = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)\left(1 - \eta_l\cos 2\delta_l\right). \tag{XX.197}$$

Por otro lado, de la expresión general para la amplitud de dispersión,

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_l-1)P_l(\cos\theta), \tag{XX.198}$$

sigue que

$$\begin{aligned} f(0) &= \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_l-1) && \text{(XX.199)}\\ &= \frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[\eta_l \operatorname{sen} 2\delta_l + i(1-\eta_l\cos 2\delta_l)\right]. && \text{(XX.200)}\end{aligned}$$

De aquí sigue

$$\mathrm{Im}f(0) = \frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-\eta_l\cos 2\delta_l). \tag{XX.201}$$

Comparando con (XX.197) se llega al teorema óptico para el caso general:

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0). \tag{XX.202}$$

Demostraremos ahora la validez de la ecuación (XX.189). Escribimos (XX.193) en la forma

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{inel}} &= \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(1-e^{2i\delta_l}e^{-2i\delta_l^*}\right)\\ &= \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i(\delta_l-\delta_l^*)}\left(e^{-i(\delta_l-\delta_l^*)}-e^{i(\delta_l-\delta_l^*)}\right)\\ &= -\frac{2\pi i}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i(\delta_l-\delta_l^*)}\operatorname{sen}(\delta_l-\delta_l^*). && \text{(XX.203)}\end{aligned}$$

Multiplicando por $v=\hbar k/m$ sigue que

$$v\sigma_{\text{inel}} = -\frac{2\pi i\hbar}{km}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\left(\delta_l-\delta_l^*\right)}\operatorname{sen}(\delta_l-\delta_l^*),$$

y usando (XX.170) se llega a (XX.189), $J=-v\sigma_{\text{inel}}$.

XX.18 Muestre que con los valores experimentales $A = 5.38$ fm, $r_0 = 1.69$ fm, la amplitud de dispersión p-n para onda s en la aproximación de rango efectivo contiene un polo que corresponde muy aproximadamente a la energía de amarre del deuterón (2.23 MeV).

La amplitud de dispersión para una onda s en la aproximación de rango efectivo está dada por la expresión (T20.90), es decir,

$$f_0 = \frac{1}{-\frac{1}{A}+\frac{1}{2}r_0k^2-ik}, \tag{XX.204}$$

con $k=\sqrt{2mE}/\hbar$. Los polos de esta amplitud son las soluciones de la ecuación

$$-\frac{1}{A}+\tfrac{1}{2}r_0k^2-ik=0. \tag{XX.205}$$

Con la sustitución

$$k = ik', \quad k' = \sqrt{-2mE}/\hbar, \tag{XX.206}$$

se obtiene

$$k'^2 - \frac{2}{r_0}k' + \frac{2}{Ar_0} = 0, \tag{XX.207}$$

cuyas raíces son

$$k'_{\pm} = \frac{1}{r_0}\left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{2r_0}{A}}\right). \tag{XX.208}$$

Sustituyendo los valores experimentales $A = 5.38$ fm y $r_0 = 1.69$ fm, se obtiene

$$k'_{\pm} = (5.92 \pm 3.61) \times 10^{14}\ \text{m}^{-1} = \begin{cases} 9.53 \times 10^{14}\ \text{m}^{-1} \\ 2.31 \times 10^{14}\ \text{m}^{-1}. \end{cases} \tag{XX.209}$$

De (XX.206) se obtiene que la energía que corresponde a estos polos es $-E = \hbar^2 k'^2/2m$, donde m es la masa reducida del sistema, que en este caso es aproximadamente igual a la mitad de la masa de un nucleón; sustituyendo los valores numéricos se encuentra que

$$E_+ = -37.8\ \text{MeV}, \tag{XX.210}$$

$$E_- = -2.22\ \text{MeV}. \tag{XX.211}$$

El segundo polo corresponde muy aproximadamente a la energía de amarre del deuterón, que es de 2.3 MeV. El otro polo es artificioso, generado por la aproximación de segundo orden en k empleada en la representación del denominador de f_0 en (XX.204).

XX.19 Demuestre que las ecuaciones de Lippmann-Schwinger pueden escribirse en la forma

$$\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle = |\Phi_a\rangle + \frac{1}{E_a - \hat{H} \pm i\eta}\hat{V}\,|\Phi_a\rangle\,.$$

Las ecuaciones de Lippmann-Schwinger son las ecuaciones (T20.143) para los estados entrantes y salientes, y tienen la forma

$$\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle = |\Phi_a\rangle + \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta}\hat{V}\,\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle\,. \tag{XX.212}$$

Puede vérseles como una versión alterna de la ecuación de Schrödinger a la que se le han agregado condiciones de frontera en el infinito, mediante el recurso de desplazar los polos con el término $\pm i\eta$, $\eta \to 0^+$. En (XX.212) $|\Phi_a\rangle$ representa las soluciones del problema no perturbado, con hamiltoniano $\hat{H}_0$, mientras que $|\Psi_a^{\pm}\rangle$ son las soluciones del problema completo, con hamiltoniano $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, que corresponden a la misma energía E_a. Es fácil verificar todo esto multiplicando (XX.212) por la izquierda por $E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta$ y simplificando, lo que da (poniendo $\eta = 0$)

$$(E_a - \hat{H}_0 - \hat{V})\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle = (E_a - \hat{H}_0)\,|\Phi_a\rangle = 0,$$

que equivale a las ecuaciones de Schrödinger para los estados entrantes y salientes $E_a\,|\Psi_a^{\pm}\rangle = \hat{H}\,|\Psi_a^{\pm}\rangle$. Una diferencia importante entre ecuaciones como (XX.212) y el método de Born, usado en el texto para el estudio del problema de dispersión, es que en este último se toma $\hat{H}_0$ como el hamiltoniano de partícula libre, mientras que aquí se le ha dejado indefinido.

Un método simple de proceder es el siguiente. Para abreviar, escribimos

$$\Delta_\pm^\circ = E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta, \quad \Delta_\pm = E_a - \hat{H} \pm i\eta. \tag{XX.213}$$

Iterando la ecuación (XX.212) se obtiene

$$\begin{aligned} \left|\Psi_a^\pm\right\rangle &= \left|\Phi_a\right\rangle + \frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\left|\Psi_a^\pm\right\rangle \\ &= \left|\Phi_a\right\rangle + \frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle + \frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle + \cdots \end{aligned} \tag{XX.214}$$

Por otra parte, utilizando la identidad entre operadores (la que se comprueba con facilidad multiplicando por la derecha con el operador $\hat{A}+\hat{B}$)

$$\frac{1}{\hat{A}+\hat{B}} = \frac{1}{\hat{A}}\left(1 - \hat{B}\frac{1}{\hat{A}+\hat{B}}\right) = \frac{1}{\hat{A}} - \frac{1}{\hat{A}}\hat{B}\frac{1}{\hat{A}+\hat{B}} \tag{XX.215}$$

con la identificación $\hat{A} = \Delta_\pm^\circ$, $\hat{B} = -\hat{V}$, de tal forma que $\hat{A}+\hat{B} = \Delta_\pm$, se obtiene, iterando,

$$\frac{1}{\Delta_\pm} = \frac{1}{\Delta_\pm^\circ} + \frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\frac{1}{\Delta_\pm} = \frac{1}{\Delta_\pm^\circ} + \frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\frac{1}{\Delta_\pm^\circ} + \frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\frac{1}{\Delta_\pm^\circ} + \cdots \tag{XX.216}$$

De aquí y (XX.214) sigue que

$$\begin{aligned} \left|\Phi_a\right\rangle + \frac{1}{\Delta_\pm}\hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle &= \left(1 + \frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V} + \frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V} + \frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V} + \cdots\right)\left|\Phi_a\right\rangle \\ &= \left|\Psi_a^\pm\right\rangle. \end{aligned} \tag{XX.217}$$

Este resultado, que escrito de manera más explícita es

$$\left|\Psi_a^\pm\right\rangle = \left|\Phi_a\right\rangle + \frac{1}{E_a - \hat{H} \pm i\eta}\hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle, \tag{XX.218}$$

representa la forma alterna de las ecuaciones de Lippmann-Schwinger solicitada.

Se puede llegar al resultado anterior sin pasar por el desarrollo en serie; un procedimiento posible se da a continuación. Multiplicando las ecuaciones de Lippmann-Schwinger (XX.212) por la izquierda con $\hat{V}$ se obtiene

$$\hat{V}\left|\Psi_a^\pm\right\rangle = \hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle + \hat{V}\frac{1}{E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta}\hat{V}\left|\Psi_a^\pm\right\rangle. \tag{XX.219}$$

Insertando este resultado en la propia ecuación (XX.212) queda

$$\left|\Psi_a^\pm\right\rangle = \left|\Phi_a\right\rangle + \frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle + \frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\left|\Psi_a^\pm\right\rangle. \tag{XX.220}$$

Multiplicando ahora por la izquierda con el operador $\Delta_\pm^\circ = E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta$ se obtiene

$$\begin{aligned} (E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta)\left|\Psi_a^\pm\right\rangle &= (E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta)\left|\Phi_a\right\rangle + \hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle + \hat{V}\frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\left|\Psi_a^\pm\right\rangle \\ &= \hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle + \hat{V}\frac{1}{\Delta_\pm^\circ}\hat{V}\left|\Psi_a^\pm\right\rangle \pm i\eta\left|\Phi_a\right\rangle, \end{aligned}$$

donde se tomó en cuenta que $\hat{H}_0 \left|\Phi_a\right\rangle = E_a \left|\Phi_a\right\rangle$. El resultado anterior lo escribimos en la forma

$$\hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle + \hat{V}\frac{1}{\Delta_{\pm}^{\circ}}\hat{V}\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle = (E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta)\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle \mp i\eta\left|\Phi_a\right\rangle, \tag{XX.221}$$

lo que substituido en la ecuación (XX.219) da

$$\hat{V}\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle = (E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta)\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle \mp i\eta\left|\Phi_a\right\rangle,$$

o bien,

$$(E_a - \hat{H}_0 - \hat{V} \pm i\eta)\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle = (E_a - \hat{H} \pm i\eta)\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle = \pm i\eta\left|\Phi_a\right\rangle, \tag{XX.222}$$

donde se escribió $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$. Multiplicando por la izquierda con el operador inverso $(E_a - \hat{H} \pm i\eta)^{-1}$ se llega a

$$\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle = \frac{\pm i\eta}{E_a - \hat{H} \pm i\eta}\left|\Phi_a\right\rangle. \tag{XX.223}$$

Usando aquí la identidad

$$\frac{\pm i\eta}{E_a - \hat{H} \pm i\eta} = \mathbb{I} - \frac{1}{E_a - \hat{H} \pm i\eta}(E_a - \hat{H}), \tag{XX.224}$$

el resultado anterior se puede reescribir en la forma

$$\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle = \left|\Phi_a\right\rangle - \frac{1}{E_a - \hat{H} \pm i\eta}(E_a - \hat{H})\left|\Phi_a\right\rangle. \tag{XX.225}$$

Usamos una vez más la ecuación de Schrödinger no perturbada para escribir

$$\hat{H}\left|\Phi_a\right\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V})\left|\Phi_a\right\rangle = E_a\left|\Phi_a\right\rangle + \hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle,$$

con lo que finalmente las ecuaciones de Lippmann-Schwinger toman la forma solicitada:

$$\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle = \left|\Phi_a\right\rangle + \frac{1}{E_a - \hat{H} \pm i\eta}\hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle. \tag{XX.226}$$

La serie (XX.214), que escrita de manera explícita es

$$\begin{aligned}\left|\Psi_a^{\pm}\right\rangle &= \left|\Phi_a\right\rangle + \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta}\hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle \\ &\quad + \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta}\hat{V}\frac{1}{E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta}\hat{V}\left|\Phi_a\right\rangle + \cdots,\end{aligned} \tag{XX.227}$$

representa un desarrollo en potencias del potencial de perturbación (responsable de la dispersión). Cuando $\hat{H}_0$ corresponde a partículas libres, (XX.227) coincide con el desarrollo de Born para los estados de dispersión. Véase el problema XX.22.

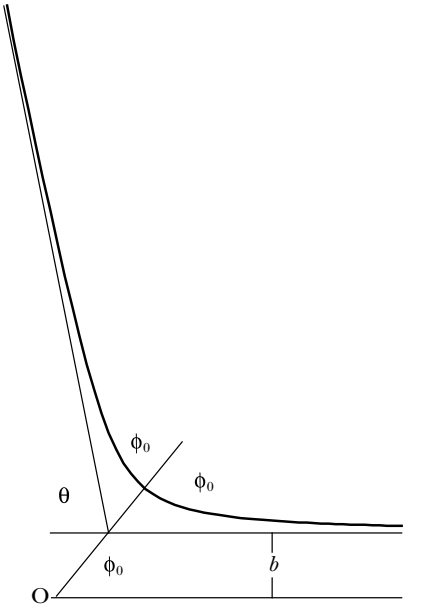


FIGURA XX.2 *Dispersión de partículas por un potencial central.*

XX.2. Problemas adicionales

XX.20 Considere la colisión elástica de partículas clásicas debida a un potencial central. Obtenga la sección diferencial eficaz en el sistema CM y aplique el resultado al caso de dispersión de partículas puntuales por una esfera absolutamente rígida de radio a.

Dado que el haz de partículas incidentes tiene una sección transversal no nula, la distancia a la que se realiza la colisión varía de evento en evento; esta distancia, que se conoce como *parámetro de impacto*, se acostumbra denotar con b y está dada por la distancia mínima entre el centro dispersor y la asíntota a la trayectoria seguida por la partícula incidente, como se ilustra en la figura XX.2. En esta figura, O representa el centro dispersor (tomado como puntual) y θ el ángulo de dispersión; como vemos de ella, a diferentes parámetros de impacto corresponden diferentes ángulos de dispersión. Si dN es el número de partículas dispersadas en la unidad de tiempo dentro de un ángulo comprendido entre θ y $\theta + d\theta$, la sección eficaz diferencial está dada por

$$d\sigma = \frac{dN}{n}, \tag{XX.228}$$

donde n representa el número de partículas que cruzan en la unidad de tiempo una sección transversal del haz incidente de área unitaria, es decir, la densidad del flujo incidente sobre el blanco, $n = j_{\text{inc}}$ (se supone que el haz es homogéneo). Supondremos que para condiciones de experimentación fijas existe una relación unívoca entre el ángulo de dispersión y el parámetro de impacto, de tal manera que las partículas que son dispersadas dentro del intervalo comprendido entre θ y $\theta + d\theta$ son aquellas cuyo parámetro de impacto se encuentra entre b y $b + db$. El número de estas partículas está dado por el producto del flujo incidente por el área del anillo circular comprendido entre b y $b + db$, es decir, $dN = n \cdot 2\pi b db$.

Usando (XX.228) se obtiene para la sección eficaz diferencial

$$d\sigma = 2\pi b db = 2\pi b \left| \frac{db(\theta)}{d\theta} \right| d\theta. \tag{XX.229}$$

Este resultado puede expresarse en términos del ángulo sólido $d\Omega$ que contiene al cono comprendido entre θ y $\theta + d\theta$, observando que $d\Omega = 2\pi \operatorname{sen}\theta d\theta$. Combinando esto con el resultado anterior se obtiene

$$d\sigma = \frac{b}{\operatorname{sen}\theta} \left| \frac{db(\theta)}{d\theta} \right| d\Omega,$$

es decir,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b(\theta)}{\operatorname{sen}\theta} \left| \frac{db(\theta)}{d\theta} \right|. \tag{XX.230}$$

Un ejemplo simple de aplicación de este resultado es precisamente al caso de la dispersión por una esfera absolutamente rígida, en cuya superficie se producen colisiones elásticas. El potencial de interacción puede escribirse como

$$V = \begin{cases} \infty, & r < a, \\ 0, & r > a. \end{cases} \tag{XX.231}$$

La colisión se ilustra en la figura XX.3; de ella es claro que el ángulo de colisión α (medido respecto a la normal a la superficie) y el de dispersión θ están relacionados por la expresión $\theta + 2\alpha = \pi$, por lo que se tiene que

$$b = a \operatorname{sen}\alpha = a \cos\frac{\theta}{2}. \tag{XX.232}$$

Introduciendo este resultado en (XX.230), queda para la sección solicitada

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a^2}{4}, \quad \sigma = \pi a^2. \tag{XX.233}$$

Vemos que la esfera rígida produce una distribución isotrópica de partículas, con sección total igual al área de su sección transversal geométrica. El resultado es intuitivamente claro, pues toda la sección geométrica de la esfera es (igualmente) efectiva para producir dispersión elástica.

XX.21 Demuestre que en el caso de dispersión de partículas puntuales clásicas por un potencial coulombiano la sección eficaz diferencial está dada por la fórmula de Rutherford.

Combinando las ecuaciones para los desplazamientos radial y angular del problema central clásico:

$$dr = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - V(r) - \frac{L^2}{2mr^2}\right)} dt,$$

$$d\phi = \frac{L}{mr^2}\, dt$$

e integrando, se obtiene

$$\phi = L \int \frac{1}{\sqrt{2m\,(E - V(r)) - L^2/r^2}} \frac{dr}{r^2}. \tag{XX.234}$$

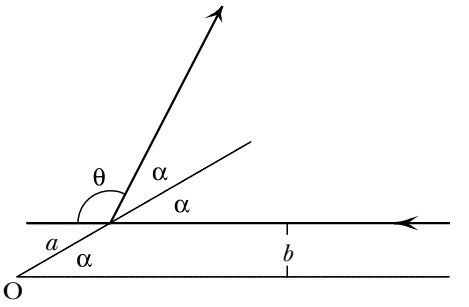


FIGURA XX.3 *Dispersión elástica por una esfera rígida.*

Con ayuda de la figura XX.2 se observa que el ángulo ϕ_0 definido por la posición del centro dispersor está dado por

$$\phi_0 = L\int_{r_{\text{mín}}}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2m\,(E-V(r)) - L^2/r^2}}\frac{dr}{r^2}, \tag{XX.235}$$

donde $r_{\text{mín}}$ corresponde al punto de retorno dado por la ecuación $E - V(r) - L^2/2mr^2 = 0$. Además, se tiene que $\theta + 2\phi_0 = \pi$, es decir, $\theta = |\pi - 2\phi_0|$. Poniendo para el problema de Kepler clásico $V = k/r$ y realizando la integración se obtiene

$$\phi_0 = \arccos\frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma^2}}, \quad \gamma = \frac{k}{mv_0^2 b}, \tag{XX.236}$$

donde se ha escrito

$$E = \tfrac{1}{2}mv_0^2, \quad L = mbv_0. \tag{XX.237}$$

Despejando b de (XX.236) se obtiene

$$b = \frac{k}{mv_0^2}\tan\phi_0 = \frac{k}{mv_0^2}\cot\frac{\theta}{2}. \tag{XX.238}$$

Derivando esta expresión respecto de θ y sustituyendo en (XX.230) se obtiene, después de algunas simplificaciones trigonométricas elementales,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{k}{2mv_0^2}\right)^2 \frac{1}{\operatorname{sen}^4\frac{\theta}{2}}. \tag{XX.239}$$

Ésta es la fórmula que derivó y utilizó Rutherford para el análisis de los experimentos que le condujeron al descubrimiento del núcleo atómico y del modelo 'planetario' del átomo. Como vemos, coincide con su versión cuántica derivada para este mismo problema, ecuación (T20.36), por lo que ambas expresiones son conocidas como *fórmula de Rutherford*.

XX.22 Obtenga las expresiones explícitas en la representación de coordenadas para realizar un desarrollo de Born hasta segundo orden.

Vamos a obtener la respuesta empleando primero los métodos utilizados en el texto, y después a partir de los resultados del problema (XX.19). En la sección 20.2 del texto se demuestra que en la región asintótica la función de onda dispersada puede escribirse en la forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d^3r', \tag{XX.240}$$

donde $V(\mathbf{r})$ representa el potencial dispersor, $\psi_{\rm inc}(\mathbf{r})$ es la función de onda incidente y

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{m_0}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \tag{XX.241}$$

es la función de Green apropiada al problema de dispersión (sólo ondas salientes en el infinito). La serie de Born se obtiene de un desarrollo iterativo reinsertando (XX.240) en sí misma y usando el resultado anterior. Escribimos primero

$$\psi(\mathbf{r}') = \psi_{\rm inc}(\mathbf{r}') + \int d^3r'' G(\mathbf{r}',\mathbf{r}'')V(\mathbf{r}'')\psi(\mathbf{r}''), \tag{XX.242}$$

y sustituimos en (XX.240):

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}) &= \psi_{\rm inc}(\mathbf{r}) + \int d^3r' G(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\left[\psi_{\rm inc}(\mathbf{r}') + \int d^3r'' G(\mathbf{r}',\mathbf{r}'')V(\mathbf{r}'')\psi(\mathbf{r}'')\right] \\
&= \psi_{\rm inc}(\mathbf{r}) + \int d^3r' G(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\psi_{\rm inc}(\mathbf{r}') \\
&\quad + \int d^3r' \int d^3r'' G(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')G(\mathbf{r}',\mathbf{r}'')V(\mathbf{r}'')\psi(\mathbf{r}'') \\
&= \psi_{\rm inc}(\mathbf{r}) + \int d^3r' G(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\psi_{\rm inc}(\mathbf{r}') \\
&\quad + \int d^3r' \int d^3r'' G(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')G(\mathbf{r}',\mathbf{r}'')V(\mathbf{r}'')\psi_{\rm inc}(\mathbf{r}'') + \cdots
\end{aligned} \tag{XX.243}$$

La primera aproximación de Born se obtiene reteniendo hasta el término lineal en el potencial, y da

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{\rm inc}(\mathbf{r}) + \int d^3r' G(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\psi_{\rm inc}(\mathbf{r}'). \tag{XX.244}$$

La corrección a segundo orden resulta entonces

$$\delta^{(2)}\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \int d^3r'' G(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')G(\mathbf{r}',\mathbf{r}'')V(\mathbf{r}'')\psi_{\rm inc}(\mathbf{r}''). \tag{XX.245}$$

Las simplificaciones que ocurren naturalmente en el cálculo de la primera corrección no se dan del todo con $\delta^{(2)}\psi(\mathbf{r})$. En particular, como se muestra en el texto, $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ se puede aproximar como $\left(-m/2\pi\hbar^2\right)(e^{ikr}/r)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}$ debido a que $|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}'|$; esto no sucede con $G(\mathbf{r}',\mathbf{r}'')$, cuyos dos argumentos son del mismo orden.

El procedimiento seguido no es sino una variante del desarrollo realizado en el problema (XX.19), pero aquí en la representación de coordenadas. Para establecer el paralelismo escribimos la ecuación (XX.227) en la representación de coordenadas, haciendo previamente la identificación

$$\hat{G}^{\pm} = \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 \pm i\eta}. \tag{XX.246}$$

De (XX.227) sigue que

$$\Psi_a^{\pm}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} \left| \Psi_a^{\pm} \right\rangle = \langle \mathbf{r} \left| \Phi_a \right\rangle + \langle \mathbf{r} \right| \hat{G}^{\pm}\hat{V} \left| \Phi_a \right\rangle + \langle \mathbf{r} \right| \hat{G}^{\pm}\hat{V}\hat{G}^{\pm}\hat{V} \left| \Phi_a \right\rangle + \cdots \tag{XX.247}$$

Tenemos

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r}|\, \hat{G}^{\pm}\hat{V}\,|\Phi_a\rangle &= \int d^3r' \int d^3r''\, \langle \mathbf{r}|\, \hat{G}^{\pm}\,\big|\mathbf{r}'\big\rangle \big\langle \mathbf{r}'\big|\, \hat{V}\,\big|\mathbf{r}''\big\rangle \big\langle \mathbf{r}''\,|\Phi_a\rangle \\ &= \int d^3r' \int d^3r'' \hat{G}^{\pm}(\mathbf{r},\mathbf{r}') \big\langle \mathbf{r}'\big|\, \hat{V}\,\big|\mathbf{r}''\big\rangle\, \delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')\Phi_a(\mathbf{r}'') \\ &= \int d^3r' \hat{G}^{\pm}(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\Phi_a(\mathbf{r}'), \end{aligned} \tag{XX.248}$$

donde hemos supuesto que $\hat{V}$ depende sólo de las coordenadas, por lo que es diagonal en esta representación. Sustituyendo en (XX.247) y conservando sólo los dos primeros términos, queda

$$\Psi_a^{\pm}(\mathbf{r}) = \Phi_a(\mathbf{r}') + \int d^3r' \hat{G}^{\pm}(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\Phi_a(\mathbf{r}'), \tag{XX.249}$$

que es (XX.240) con una notación ligeramente diferente (y más general).

De manera análoga se puede tratar el término de segundo orden, para obtener

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r}|\, \hat{G}^{\pm}\hat{V}\hat{G}^{\pm}\hat{V}\,|\Phi_a\rangle &= \int d^3r' \int d^3r'' \int d^3r''' \int d^3r^{iv}\, \langle \mathbf{r}|\, \hat{G}^{\pm}\,\big|\mathbf{r}'\big\rangle \big\langle \mathbf{r}'\big|\, \hat{V}\,\big|\mathbf{r}''\big\rangle \\ &\quad \times \big\langle \mathbf{r}''\big|\, \hat{G}^{\pm}\,\big|\mathbf{r}'''\big\rangle \big\langle \mathbf{r}'''\big|\, \hat{V}\,\big|\mathbf{r}^{iv}\big\rangle \big\langle \mathbf{r}^{iv}\,|\Phi_a\rangle \\ &= \int d^3r' \int d^3r'''\, \langle \mathbf{r}|\, \hat{G}^{\pm}\,\big|\mathbf{r}'\big\rangle\, V(\mathbf{r}') \big\langle \mathbf{r}'\big|\, \hat{G}^{\pm}\,\big|\mathbf{r}'''\big\rangle\, V(\mathbf{r}''')\Phi_a(\mathbf{r}''') \\ &= \int d^3r' \int d^3r'' \hat{G}^{\pm}(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\hat{G}^{\pm}(\mathbf{r}',\mathbf{r}'')V(\mathbf{r}'')\Phi_a(\mathbf{r}''), \end{aligned} \tag{XX.250}$$

que corresponde a la ecuación (XX.245).

XX.23 Obtenga la sección diferencial de dispersión por un potencial $V(r)$ utilizando la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo a primer orden.

Tomamos como hamiltoniano no perturbado el de partícula libre y consideramos el potencial de interacción $V(\mathbf{r})$ como una perturbación dependiente del tiempo. Con el fin de normalizar apropiadamente las funciones de onda no perturbadas y calcular su densidad sin dificultad, adoptaremos el artificio de usar condiciones a la frontera en un cubo de lado L. Con esta convención, los estados de momento lineal $\mathbf{p}$ y energía E definidos se escriben en la forma usual de Born,

$$\psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{XX.251}$$

con $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$. La densidad de estados finales con energía E se determina como sigue: Sea $\rho(E)dEd\Omega$ el número de estados con energía $E = p^2/2m$ en el intervalo $[E, E+dE]$ y vector de onda $\mathbf{k}$ en el ángulo sólido $d\Omega$. Se tiene de la ecuación (T17.81)

$$\rho\,(E)\,dEd\Omega = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 d^3p = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 p^2 dpd\Omega, \tag{XX.252}$$

de donde sigue que (cf. ecuación (T17.82))

$$\rho\left(E\right)=\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^{3}p^{2}\frac{dp}{dE}=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^{3}\frac{mp}{\hbar^{3}}. \tag{XX.253}$$

Si las partículas del flujo incidente tienen energía $E=\frac{1}{2}mv_a^2$ y momento $\hbar\mathbf{k}_a$, para partículas dispersadas con momento $\hbar\mathbf{k}_b$ la regla de oro de la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, ecuación (T17.61), da la probabilidad de transición (del estado a al estado b) por unidad de tiempo

$$W_{ba}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle\mathbf{k}_b\mid V\left(r\right)\mid\mathbf{k}_a\rangle\right|^{2}\rho\left(E\right). \tag{XX.254}$$

Denotando con $d\sigma(\theta,\varphi)$ la sección diferencial del proceso de dispersión, es decir, el número de partículas dispersadas dentro del ángulo sólido $d\Omega$ alrededor de la dirección (θ,φ) de $\mathbf{k}_b$, por unidad de tiempo y unidad de flujo incidente, podemos escribir, tomando en cuenta que el flujo incidente es $j_{\text{inc}}=v_a/L^3$,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{L^{3}}{v_{a}}\right)W_{ba}=\frac{2\pi L^{3}}{\hbar v_{a}}\rho\left(E\right)\left|\langle\mathbf{k}_b\mid V\left(r\right)\mid\mathbf{k}_a\rangle\right|^{2}, \tag{XX.255}$$

es decir,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{m^{2}}{4\pi^{2}\hbar^{4}}\left|\int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}V\left(r\right)d^{3}r\right|^{2},\quad\mathbf{q}=\mathbf{k}_b-\mathbf{k}_a, \tag{XX.256}$$

Esta expresión es consistente con la amplitud de dispersión (T20.21) dada por la primera aproximación de Born,

$$f\left(\theta,\varphi\right)=-\frac{m}{2\pi\hbar^{2}}\int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}V\left(r\right)d^{3}r^{2}. \tag{XX.257}$$

XX.24 Determine la sección diferencial para el potencial g/r en la primera aproximación de Born (con g una constante).

La amplitud de dispersión en la primera aproximación de Born está dada por la fórmula (XX.59),

$$f(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^{2}q}\int_{0}^{\infty}rV(r)\operatorname{sen}qrdr=-\frac{2mg}{\hbar^{2}q}\int_{0}^{\infty}\operatorname{sen}qrdr. \tag{XX.258}$$

La evaluación de la integral representa un problema, pues el integrando no tiene un valor definido en el infinito. Para resolver esta dificultad se acostumbra redefinir la integral, agregándole un factor que la haga converger en el infinito, pero que no altere sensiblemente su valor. Como es de esperar que los efectos del potencial en la región asintótica sean mínimos, esta modificación no puede alterar el resultado físico. Escribimos entonces, con $\epsilon\to0^{+}$,

$$\int_{0}^{\infty}\operatorname{sen}qrdr\to\lim_{\epsilon\to0}\int_{0}^{\infty}e^{-\epsilon r}\operatorname{sen}qrdr=\lim_{\epsilon\to0}\frac{q}{\epsilon^{2}+q^{2}}=\frac{1}{q}. \tag{XX.259}$$

Resulta así

$$f(\theta)=-\frac{2mg}{\hbar^{2}q^{2}}. \tag{XX.260}$$

La sección diferencial queda

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{q^4}. \tag{XX.261}$$

Este resultado coincide con el dado en la ecuación (T20.36), que se obtuvo a partir del estudio del potencial de Coulomb con apantallamiento.

XX.25 El número de partículas dispersadas por un potencial por segundo dentro del ángulo sólido $d\Omega$ en una dirección dada es

$$dN = J d\sigma,$$

o, lo que es equivalente,

$$\frac{dN}{J} = \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega.$$

A su vez, la sección diferencial de dispersión de una partícula con energía E y carga q dispersada por una carga fija Q está dada por la sección de Rutherford, y es

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{qQ}{4E}\right)^2 \frac{1}{\operatorname{sen}^4(\theta/2)}.$$

¿Cuál es la fracción de partículas dispersadas en un cono diferencial $(\theta, \theta + d\theta)$ por un blanco constituído por N centros dispersores por unidad de área? Emplee su resultado para determinar la fracción de partículas α de 5 MeV, que es dispersada por una lámina de oro de 1 μm de espesor, dentro del cono diferencial $(\theta, \theta + d\theta)$ alrededor de $\theta = \pi/2$.

Si suponemos que cada partícula del haz incidente "siente" sólo la acción de un centro dispersor y que hay sólo un evento de dispersión para cada dispersor, llamando δN al número de partículas dispersadas dentro del cono de apertura $d\Omega$ se tiene que

$$dN = N \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \tag{XX.262}$$

La fracción de partículas dispersadas dentro del cono $(\theta, \theta + d\theta)$ es

$$\delta N = N \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} \operatorname{sen}\theta \, d\theta \, d\varphi = 2\pi N \frac{d\sigma}{d\Omega} \operatorname{sen}\theta \, d\theta. \tag{XX.263}$$

Para una lámina de densidad ρ y espesor d, constituída por átomos con masa atómica A, el número de centros dispersores por unidad de área N es

$$N = N_a \frac{\rho d}{A}, \tag{XX.264}$$

con $N_a = 6.023 \times 10^{26}$ $(\mathrm{kg \cdot mol})^{-1}$ el número de Avogadro. Para el oro se tiene $\rho = 19.5$ gr/cm^3, $A = 197$, de donde sigue $N = 5.9 \times 10^{22} d$ átomos/cm^2. Con esto queda determinado el valor de δN para un espesor dado del blanco.

Aplicaremos el resultado al caso de partículas α con energía de 5 MeV dispersadas por núcleos de átomos de oro de una lámina de 1μm de espesor. Para este sistema se tiene $qQ/E = 4.6 \times 10^{-14}$ m, con lo cual resulta

$$\delta N \left(\theta = \frac{\pi}{2}\right) = \pi N_a \frac{\rho d}{2A} \left(\frac{qQ}{E}\right)^2 d\theta \simeq 2 \times 10^{-4} d\theta.$$

XX.26 Electrones de 10 keV son dispersados elásticamente por un potencial, de tal manera que la sección diferencial para $\theta = 0$ es de 1 mbarn/sr y la sección eficaz total es de 15 mbarn. Determine la amplitud de dispersión hacia adelante y establezca si es suficiente la onda s para analizar este proceso.

Del teorema óptico sigue que la parte imaginaria de la amplitud hacia adelante está dada por

$$\mathrm{Im}f(0) = \frac{k}{4\pi}\sigma. \tag{XX.265}$$

En el presente caso tenemos $k = \sqrt{2m_0E}/\hbar = 5.123 \times 10^{-4}\ \mathrm{fm}^{-1}$ y $\sigma = 1.5\ \mathrm{fm}^2$, por lo que

$$\mathrm{Im}f(0) = 6.11 \times 10^{-5}\ \mathrm{fm} \cdot \mathrm{sr}^{-1/2}. \tag{XX.266}$$

Por otro lado podemos escribir

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\theta=0} = |f(0)|^2 = |\mathrm{Re}f(0)|^2 + |\mathrm{Im}f(0)|^2\,, \tag{XX.267}$$

y sustituyendo valores resulta

$$|\mathrm{Re}f(0)|^2 = \left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\theta=0} - |\mathrm{Im}f(0)|^2 \simeq 1\,\mathrm{mbarn/sr} = 0.1\,\mathrm{fm}^2\,/\mathrm{sr},$$
$$|\mathrm{Re}f(0)| = 0.316\,\mathrm{fm} \cdot \mathrm{sr}^{-1/2}. \tag{XX.268}$$

Si la única contribución a la sección total proviniera de la onda s, se tendría, integrando sobre el ángulo sólido,

$$\sigma = 4\pi \left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\theta=0} = 12.57\,\mathrm{mbarn}. \tag{XX.269}$$

La discrepancia entre este resultado y los 15 mbarn experimentales indica que hay una contribución no despreciable de otras ondas parciales.

XX.27 Determine el desfasamiento y la amplitud de la onda s debidos al potencial $V(r) = (g/a)\delta(r-a)$, $a > 0$.

La función de onda radial para una onda s es solución de la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' + V(r)u = Eu$$

y se puede escribir en la forma (con $k = \sqrt{2mE}/\hbar$)

$$u(r) = A\,\mathrm{sen}\,kr, \quad 0 \le r < a, \tag{XX.270}$$
$$u(r) = \alpha A\,\mathrm{sen}(kr + \delta_0), \quad r > a. \tag{XX.271}$$

De la condición de continuidad de u en $r = a$ sigue que

$$\alpha\,\mathrm{sen}\,(ka + \delta_0) = \mathrm{sen}\,ka. \tag{XX.272}$$

Una segunda condición se obtiene integrando la ecuación radial alrededor de la discontinuidad en el potencial, lo que da el valor de la discontinuidad de la derivada de u en $r = a$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} u''dr + \frac{g}{a}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}\delta(r-a)u(r)dr = E\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}u(r)dr = 2Eu(a)\varepsilon,$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[u'(a+\varepsilon) - u'(a-\varepsilon)\right] + \frac{g}{a}u(a) = 0, \tag{XX.273}$$

es decir,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}k\left[\alpha\cos\left(ka+\delta_0\right)-\cos ka\right]+\frac{g}{a}\operatorname{sen}ka=0. \tag{XX.274}$$

El valor de α obtenido de (XX.272) lo sustituimos en (XX.274), para obtener

$$\tan\left(ka+\delta_0\right)=\frac{\tan ka+\tan\delta_0}{1-\tan ka\tan\delta_0}=\frac{\operatorname{sen}ka}{(\eta/ka)\operatorname{sen}ka+\cos ka},$$

con $\eta=2m_0g/\hbar^2$. De aquí sigue de inmediato que

$$\tan\delta_0(k)=-\eta\frac{\operatorname{sen}^2 ka}{ka+\eta\operatorname{sen}ka\cos ka}. \tag{XX.275}$$

Empleando la fórmula

$$\arctan z=\frac{i}{2}\ln\frac{1-iz}{1+iz} \tag{XX.276}$$

sigue de (XX.275) con $z=\delta_0$ que

$$e^{2i\delta_0}=\frac{ka+\eta e^{-ika}\operatorname{sen}ka}{ka+\eta e^{ika}\operatorname{sen}ka}. \tag{XX.277}$$

Luego la amplitud de dispersión de la onda s como función de la energía resulta, usando (XX.106) con $l=0$ (o (T20.63) y (T20.64)),

$$f_0(k)=\frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_0}-1\right)=-\frac{\eta a}{ka}\frac{\operatorname{sen}^2 ka}{ka+\eta e^{ika}\operatorname{sen}ka}. \tag{XX.278}$$

Un análisis de los polos de este resultado muestra que para $\eta<-1$ (que corresponde a potencial atractivo) existe un único estado ligado (polo real, energía negativa), mientras que para $-1<\eta<0$ existe un estado resonante (polo complejo).[3] La sección diferencial de dispersión es

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{2m_0ga}{\hbar^2}\right)^2\frac{S^4(ka)}{1+\eta^2S^2(ka)},\quad S(x)=\frac{\operatorname{sen}x}{x}. \tag{XX.279}$$

XX.28 Calcule la sección diferencial para la dispersión elástica de deuterones sobre deuterones en el sistema CM, suponiendo que la interacción no afecta los espines de las partículas individuales y que los haces no están polarizados.

Los deuterones tienen espín 1, por lo que pueden existir los siguientes estados de espín de un sistema de dos deuterones:

a) $s_3^{(1)}=s_3^{(2)}$: 3 estados,

b) $s_3^{(1)}\neq s_3^{(2)}$: 6 estados.

En total, son 9 los posibles estados y, por tratarse de haces no polarizados, cada uno de ellos tiene la misma amplitud de probabilidad de realización. En el caso a) las partículas son iguales y debe tomarse la amplitud simetrizada

$$f(s_3^{(1)}=s_3^{(2)})=f(\theta)+f(\pi-\theta). \tag{XX.280}$$

[3] Un análisis más detallado puede verse en Galindo y Pascual (1989), problema 8.21.

En el caso b) las partículas son diferentes y la amplitud debe tomarse simplemente como

$$f(s_3^{(1)} \neq s_3^{(2)}) = f(\theta). \tag{XX.281}$$

Sin embargo, en este mismo caso el intercambio $f(s_3^{(1)} s_3^{(2)} \to s_3^{(2)} s_3^{(1)})$ es equivalente al intercambio $f(\theta) \leftrightarrow f(\pi - \theta)$. De todas estas consideraciones sigue que la sección eficaz diferencial apropiadamente simetrizada es

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \tfrac{1}{9}\left[3\left|f(\theta) + f(\pi-\theta)\right|^2 + 6\left|f(\theta)\right|^2 + 6\left|f(\pi-\theta)\right|^2\right] \\ &= \left|f(\theta)\right|^2 + \left|f(\pi-\theta)\right|^2 + \tfrac{1}{3}\left(f(\theta)f^*(\pi-\theta) + f^*(\theta)f(\pi-\theta)\right). \end{aligned} \tag{XX.282}$$

En particular, para $\theta = \pi/2$ se obtiene

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\theta=\pi/2} = \tfrac{8}{3}\left|f(\frac{\pi}{2})\right|^2. \tag{XX.283}$$

En un conteo "clásico" (partículas distinguibles), $|f(\theta)|^2$ y $|f(\pi-\theta)|^2$ serían equivalentes y se obtendría

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\theta=\pi/2} = 2\left|f(\frac{\pi}{2})\right|^2. \tag{XX.284}$$

Vemos que la interferencia cuántica eleva este resultado $4/3$ veces.

XX.29 Encuentre la probabilidad de que neutrones lentos inviertan su espín, como resultado de la dispersión sobre protones. Considere que antes de la colisión el espín de los neutrones es $1/2$ sobre algún eje Oz, y el de los protones, el opuesto.

Denotamos el estado inicial de los espines como $\chi_n^+\chi_p^-$ y lo desarrollamos en términos de los estados de singulete y triplete:

$$\chi_n^+\chi_p^- = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_n^+\chi_p^- + \chi_n^-\chi_p^+\right) + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_n^+\chi_p^- - \chi_n^-\chi_p^+\right)\right]. \tag{XX.285}$$

La amplitud de dispersión f es proporcional a

$$f \sim \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[f_3\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_n^+\chi_p^- + \chi_n^-\chi_p^+\right) + f_1\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_n^+\chi_p^- - \chi_n^-\chi_p^+\right)\right],$$

es decir,

$$f \sim \tfrac{1}{2}\left(f_3 + f_1\right)\chi_n^+\chi_p^- + \tfrac{1}{2}\left(f_3 - f_1\right)\chi_n^-\chi_p^+, \tag{XX.286}$$

en donde f_1 y f_3 son las amplitudes de dispersión del singulete y del triplete, respectivamente. De aquí sigue de inmediato que la probabilidad de que los espines inviertan su orientación es

$$w_{+\leftrightarrow-} = \frac{1}{2}\frac{\left|f_3 - f_1\right|^2}{\left|f_1\right|^2 + \left|f_3\right|^2}. \tag{XX.287}$$

XX.30 La interacción entre neutrones y protones depende del espín total del sistema. A pequeñas energías la sección eficaz para el triplete es aproximadamente $\boldsymbol{\sigma}^{(1)} = 4\pi\left|f_3\right|^2 \approx 2 \times 10^{-24}$ cm ^{2}, mientras que la del singulete resulta

$\boldsymbol{\sigma}^{(0)} = 4\pi\,|f_1|^2 \approx 78 \times 10^{-24}$ cm^2. Para describir los procesos de dispersión de neutrones sobre protones es conveniente introducir el operador

$$\hat{f} = \tfrac{1}{4}(f_1 + 3f_3) - \tfrac{1}{4}(f_1 - f_3)\hat{\boldsymbol{\sigma}}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_p,$$

cuyo valor esperado en los estados singulete y triplete es f_1 y f_3, respectivamente. La sección de dispersión para polarización arbitraria de los neutrones queda dada por

$$\sigma = 4\pi\overline{\hat{f}^2},$$

donde el promedio debe tomarse sobre los estados de espín del sistema. Considere un haz incidente de neutrones cuyo espín se describe con el espinor $\begin{pmatrix} e^{-i\alpha}\cos\beta \\ e^{i\alpha}\,\mathrm{sen}\,\beta \end{pmatrix}$, mientras que el espinor de los protones corresponde a polarización total sobre el eje Oz, $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Determine la sección de dispersión para este caso.

De la definición dada del operador $\hat{f}$,

$$\hat{f} = \tfrac{1}{4}\,(f_1 + 3f_3) - \tfrac{1}{4}\,(f_1 - f_3)\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_p, \tag{XX.288}$$

y las propiedades de las matrices de Pauli, sigue que

$$\hat{f}^2 = \tfrac{1}{4}f_1^2 + \tfrac{3}{4}f_3^2 - \tfrac{1}{4}\left(f_1^2 - f_3^2\right)\hat{\boldsymbol{\sigma}}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_p. \tag{XX.289}$$

El estado de espín del sistema neutrón-protón es

$$\begin{pmatrix} e^{-i\alpha}\cos\beta \\ e^{i\alpha}\,\mathrm{sen}\,\beta \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p, \tag{XX.290}$$

y el promedio del operador de espín $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_p$ sobre este estado resulta

$$\overline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_p} = \overline{\hat{\sigma}_{n3}}\,\overline{\hat{\sigma}_{p3}} = \cos^2\beta - \mathrm{sen}^2\,\beta = \cos 2\beta. \tag{XX.291}$$

Por lo tanto, la sección eficaz es

$$\sigma = 4\pi\overline{\hat{f}^2} = \pi\left[f_1^2 + 3f_3^2 - \left(f_1^2 - f_3^2\right)\cos 2\beta\right]. \tag{XX.292}$$

Este resultado se puede escribir en la forma

$$\sigma = \tfrac{1}{4}\sigma^{(0)} + \tfrac{3}{4}\sigma^{(1)} - \tfrac{1}{4}\left(\sigma^{(0)} - \sigma^{(1)}\right)\cos 2\beta. \tag{XX.293}$$

Un caso de especial interés ocurre cuando el haz incidente de neutrones no está polarizado, de tal manera que todos los valores de β resultan igualmente probables y debemos tomar $\overline{\cos 2\beta} = 0$ en (XX.293). Resulta para la sección promediada

$$\bar{\sigma} = \tfrac{1}{4}\sigma^{(0)} + \tfrac{3}{4}\sigma^{(1)}. \tag{XX.294}$$

Este resultado es intuitivamente claro, pues los cuatro posibles estados de espín total son igualmente probables en ausencia de polarización, lo que le asigna al triplete un peso tres veces mayor que el del singulete.

* **XX.31** En las interacciones fuertes el isoespín se conserva. Utilice esta información para establecer la relación que esta ley de conservación impone entre las secciones de dispersión elástica de los procesos (a) $\pi^+p \to \pi^+p$, (b) $\pi^-p \to \pi^-p$ y (c) $\pi^-p \to \pi^\circ n$.

En el problema XII.44 se demuestra que las funciones de onda de isoespín de los estados que intervienen en las reacciones a considerar, son

$$\pi^+ p = \chi_3(3/2), \tag{XX.295}$$

$$\pi^- p = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left[\chi_3(-1/2) - \sqrt{2}\chi_1(-1/2)\right], \tag{XX.296}$$

$$\pi^\circ n = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{2}\chi_3(-1/2) + \chi_1(-1/2)\right], \tag{XX.297}$$

donde hemos utilizado la notación $\chi_{2I}(I_3)$ para los multipletes de isoespín (doblete χ_1 y cuadruplete χ_3). Como el isoespín se conserva durante las interacciones fuertes, el hamiltoniano que las describe no puede mezclar estados con diferente valor de isoespín, por lo que debe tener la forma $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_3$, sin término mixto $\hat{H}_{13}$; además, todos los elementos de matriz que involucren diferentes valores de isoespín deben anularse. Estas consideraciones reducen las amplitudes de transición entre estados inicial y final de interés a dos, que son

$$M_1 = \langle \psi_f(I = 1/2)| \hat{H}_1 |\psi_i(I = 1/2)\rangle, \tag{XX.298}$$

$$M_3 = \langle \psi_f(I = 3/2)| \hat{H}_3 |\psi_i(I = 3/2)\rangle \tag{XX.299}$$

y nos permiten determinar las restricciones que la conservación del isoespín impone a la sección de cada una de las tres reacciones a considerar. Con K una constante apropiada (determinada por la dinámica del problema), escribimos

$$\begin{aligned}
\sigma_a &= K\left|\langle\psi_{fa}|\hat{H}|\psi_{ia}\rangle\right|^2 \\
&= K\left|\langle\chi_3|(\hat{H}_1+\hat{H}_3)|\chi_3\rangle\right|^2 = K\left|\langle\chi_3|\hat{H}_3|\chi_3\rangle\right|^2 \equiv K|M_3|^2; \qquad \text{(XX.300)}\\
\sigma_b &= K\left|\langle\psi_{fb}|\hat{H}|\psi_{ib}\rangle\right|^2 \\
&= K\left|\left\langle \tfrac{1}{\sqrt{3}}\chi_3 - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\chi_1\right|(\hat{H}_1+\hat{H}_3)\left|\tfrac{1}{\sqrt{3}}\chi_3 - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\chi_1\right\rangle\right|^2 \\
&= K\left|\tfrac{1}{3}\langle\chi_3|\hat{H}_3|\chi_3\rangle + \tfrac{2}{3}\langle\chi_1|\hat{H}_1|\chi_1\rangle\right|^2 \\
&= K\left|\tfrac{1}{3}M_3 + \tfrac{2}{3}M_1\right|^2 = \tfrac{1}{9}K|M_3+2M_1|^2; \qquad \text{(XX.301)}\\
\sigma_c &= K\left|\langle\psi_{fc}|\hat{H}|\psi_{ic}\rangle\right|^2 \\
&= K\left|\left\langle \sqrt{\tfrac{2}{3}}\chi_3 + \tfrac{1}{\sqrt{3}}\chi_1\right|(\hat{H}_1+\hat{H}_3)\left|\tfrac{1}{\sqrt{3}}\chi_3 - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\chi_1\right\rangle\right|^2 \\
&= K\left|\tfrac{\sqrt{2}}{3}\langle\chi_3|\hat{H}_3|\chi_3\rangle - \tfrac{\sqrt{2}}{3}\langle\chi_1|\hat{H}_1|\chi_1\rangle\right|^2 \\
&= \tfrac{2}{9}K|M_3 - M_1|^2. \qquad \text{(XX.302)}
\end{aligned}$$

De aquí sigue que las secciones se encuentran en la relación

$$\sigma_a : \sigma_b : \sigma_c :: |M_3|^2 : \tfrac{1}{9}|M_3+2M_1|^2 : \tfrac{2}{9}|M_3 - M_1|^2. \tag{XX.303}$$

En la región en que el sistema πp tiene energías alrededor de 1200-1300 MeV, la amplitud M_3 domina sobre la M_1; para tales energías se tiene aproximadamente

que

$$\sigma_a : \sigma_b : \sigma_c :: 9 : 1 : 2, \tag{XX.304}$$

$$\frac{\sigma_{\pi^+ p}}{\sigma_{\pi^- p}} = \frac{\sigma_a}{\sigma_b + \sigma_c} \simeq \frac{9}{1+2} = 3. \tag{XX.305}$$

Esta predicción se confirma satisfactoriamente con el experimento en la región de energías indicada.

En el cálculo anterior no fue necesario hacer referencia explícita a la dinámica. La conservación del isoespín y los respectivos coeficientes de Clebsch-Gordan son los que determinan las relaciones entre las secciones eficaces obtenidas para estos tres procesos.

XX.32 Utilice el método WKB para determinar aproximadamente los desfasamientos producidos por un potencial central.

Consideraremos que en la región de interés hay un solo punto clásico de retorno, localizado en $r_0(l)$. Como se observó en el problema XIII.32, en la mayoría de los casos conviene hacer la sustitución $l(l+1) \to (l+\frac{1}{2})^2$ para mejorar el comportamiento de la solución en el origen. Con este cambio escribimos

$$p(r) = \left[2m_0 E - V(r) - \frac{\hbar^2 \left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2} \right]^{1/2} \tag{XX.306}$$

y usamos las ecuaciones (T7.22) y (T7.23) del texto para escribir la función de onda radial WKB en la región clásicamente prohibida

$$u(r) = \frac{A}{\sqrt{|p(r)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_r^{r_0} |p(r')| dr'}, \quad r < r_0, \tag{XX.307}$$

y en la región permitida

$$u(r) = \frac{2A}{\sqrt{p(r)}} \operatorname{sen}\left[\frac{1}{\hbar} \int_{r_0}^{r} p(r') dr' + \frac{\pi}{4} \right], \quad r > r_0. \tag{XX.308}$$

En ausencia de interacción ($V(r) = 0$, $\delta_l = 0$), la componente l de la función de onda se comporta en la región asintótica, según sigue de la ecuación (T20.69) del texto, como $\sim \operatorname{sen}(pr/\hbar - \pi l/2)$; comparando con el resultado anterior, se obtiene para el corrimiento de las fases

$$\delta_l^{WKB} = \frac{\pi}{2}\left(l+\tfrac{1}{2}\right) + \int_{r_0}^{\infty} dr \left[\sqrt{k^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2} V(r) - \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}} - k \right] - k r_0. \tag{XX.309}$$

Este resultado, que es la relación solicitada, es confiable en general sólo para desfasamientos grandes, es decir, en la región semiclásica. Con una integración por partes se puede escribir

$$\delta_l^{WKB} = \frac{\pi}{2}\left(l+\tfrac{1}{2}\right) - \int_{r_0}^{\infty} dr\, r \frac{d}{dr} \sqrt{k^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2} V(r) - \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}}. \tag{XX.310}$$

La ecuación (XX.309) permite establecer fácilmente un resultado interesante. En un problema clásico de dispersión, el ángulo de deflexión está dado por

$$\Theta = \pi - 2J \int_{r_{\text{mín}}}^{\infty} \frac{dr}{r^2 p(r)}, \tag{XX.311}$$

donde $r_{\text{mín}}$ es la distancia de máximo acercamiento y J el momento angular del sistema. Tomando la derivada de δ_l^{WKB} respecto de l se obtiene

$$\frac{d\delta_l^{WKB}}{dl} = \frac{\pi}{2} - \left(l + \tfrac{1}{2}\right)\hbar \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r^2 p(r)}. \tag{XX.312}$$

La comparación entre ambas expresiones sugiere definir el equivalente semiclásico del ángulo de deflexión como el doble de esta derivada,[4]

$$\Theta_l^{WKB} = 2\frac{d\delta_l^{WKB}}{dl}. \tag{XX.313}$$

XX.3. Ejercicios

XX.33 Demuestre que en el caso en que es la partícula 1 la que se encuentra en reposo inicialmente, la ecuación (XX.13) se reduce a

$$\tan\theta_{1L} = \frac{\operatorname{sen}\theta^*}{\cos\theta^* + 1} = \tan\tfrac{1}{2}\theta^*.$$

XX.34 Demuestre que en el caso general la ecuación (XX.17) debe escribirse en la forma

$$E_{CM} = \frac{m_1}{M}E_L + \frac{m_2}{M}\left[m_1\mathbf{v}_1 + \tfrac{1}{2}(m_2 - m_1)\mathbf{v}_2\right]\cdot\mathbf{v}_2.$$

XX.35 Una partícula de masa m_1 y momento p_1 incide sobre una partícula de masa m_2 en reposo. La colisión da lugar a la formación de dos partículas de masas m_3 y m_4, con momento p_3 y p_4 en las direcciones θ_3 y θ_4, respectivamente. Demuestre que basta determinar todas las masas y dos variables, como p_3 y θ_3 por ejemplo, para conocer la exotermicidad de la colisión, medida con la cantidad $Q = T_f - T_i$, con T la energía cinética. Demuestre asimismo que la máxima energía cinética que la colisión puede transferir elásticamente ($Q = 0$) es

$$\Delta E_{\text{máx}} = \frac{2m_2}{M^2}p_1^2 \quad (m_3 = m_1,\ m_4 = m_2).$$

XX.36 Considere la colisión clásica elástica de dos pelotas de radios a y b.

a) Si una de ellas está fija (masa infinita) demuestre que $d\sigma/d\Omega$ es isotrópica e independiente de la energía. Determine la sección eficaz total.

b) Suponiendo que las dos pelotas tienen la misma masa, calcule $(d\sigma/d\Omega)_{\text{lab}}$.

XX.37 Determine la amplitud de dispersión y la sección eficaz diferencial en la primera aproximación de Born para el potencial $V_0\delta(r - R)$.

[4] Mayores detalles pueden verse en R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles* (McGraw-Hill, Nueva York, 1966), capítulos 5 y 18.

XX.38 Determine la sección eficaz diferencial y total en la primera aproximación de Born para el potencial gaussiano $V_0 \exp(-\alpha^2 r^2)$.

XX.39 Partículas de masa m inciden sobre un potencial central de la forma

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r < a, \\ -V_0, & a \leq r \leq 2a, \\ 0, & r > 2a, \end{cases}$$

$V_0 > 0$. Demuestre que la sección eficaz elástica σ es tal que

$$\lim_{v \to 0} \sigma = 4\pi \left[k_0^{-1} \tan(k_0 a) - 2a\right]^2$$

cuando la velocidad v de las partículas tiende a cero, con $k_0 = \left[2mV_0/\hbar^2\right]^{1/2}$.

XX.40 Utilice la ecuación (XX.227) para calcular la amplitud de transición del estado $|\Phi_a\rangle$ a un estado propio $|\Phi_b\rangle$ de $\hat{H}_0$. Compare sus resultados con los dados por las ecuaciones (T14.16) y (T14.17) de la teoría de perturbaciones.

XX.41 La amplitud de dispersión para cierta interacción está dada por

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\left(e^{ika} \operatorname{sen} ka + 3ie^{2ika} \cos\theta\right),$$

donde a es la longitud característica del potencial de interacción y k es el número de onda de la partícula incidente. Determine la sección diferencial para ondas s para esta interacción.

XX.42 Determine el desfasamiento de la onda s y la sección eficaz total producida por un pozo esférico uniforme a muy bajas energías. Compare con la sección determinada usando la primera aproximación de Born.

XX.43 Determine los desfasamientos δ_l producidos por el potencial $V(r) = g/r^2$. Determine la sección eficaz diferencial y verifique que es inversamente proporcional a la energía.

XX.44 Un análisis de la dispersión de partículas de masa m y energía E por un centro dispersor fijo con longitud característica a lleva a corrimientos de fase de la forma

$$\delta_l = \operatorname{arc\,sen}^{-1}\left[\frac{(ika)^l}{\sqrt{(2l+1)!}}\right].$$

Encuentre una expresión cerrada para la sección eficaz total como función de la energía incidente.

XX.45 Partículas monoenergéticas son dispersadas por un conjunto de N potenciales iguales estáticos, centrados en las posiciones $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N$. Demuestre que en la aproximación de Born la sección diferencial es

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma_0}{d\Omega}\left|\sum_{k=1}^{N} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_k/\hbar}\right|,$$

donde $d\sigma_0/d\Omega$ es la sección diferencial debida a uno de los potenciales y $\mathbf{q}$ el momento transferido. Determine la forma que toma esta sección eficaz cuando los potenciales son equidistantes, separados la distancia $\mathbf{d}$.

* **XX.46** El movimiento de electrones en un sólido cristalino se realiza esencialmente en un plano. Considere que en una zona de tal plano existe una impureza, que puede representarse como un potencial muy localizado. Demuestre que la función de Green del correspondiente problema estacionario con energía E, y que corresponde a onda saliente en el infinito, se puede escribir en la forma

$$G(\mathbf{x}-\mathbf{x}',E)=\lim_{\varepsilon\to 0^+}\frac{1}{(2\pi)^2}\int\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}}{(\hbar^2k^2/2m)-E-i\varepsilon}d^2k.$$

Considere el problema de dispersión de una onda plana y demuestre que la función de onda dispersada está dada por la expresión asintótica

$$\psi(\mathbf{x})=Ae^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{x}}+e^{i\pi/4}f(\mathbf{k}',\mathbf{k})\frac{e^{ik\rho}}{\sqrt{\rho}},\quad \rho=|\mathbf{x}|\,,$$

con la amplitud de dispersión bidimensional dada por

$$f(\mathbf{k}',\mathbf{k})=-\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{2}{\pi k}\right)^{\frac{1}{2}}\int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}}V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d^2x.$$

Demuestre finalmente que en la aproximación de Born esta amplitud se reduce a

$$f(\mathbf{k}',\mathbf{k})=-\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{2}{\pi k}\right)^{\frac{1}{2}}\int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\cdot\mathbf{x}}V(\mathbf{x})d^2x.$$

XXI. La matriz de densidad

XXI.1. Problemas del texto

XXI.1 Demuestre que $\mathrm{tr}\,\hat{A}\hat{B}\hat{C} = \mathrm{tr}\,\hat{C}\hat{A}\hat{B}$.

El elemento de matriz ij del producto de tres matrices cuadradas $\hat{A}$, $\hat{B}$ y $\hat{C}$ con elementos a_{ij}, b_{ij}, c_{ij}, respectivamente, es

$$\begin{aligned}(\hat{A}\hat{B}\hat{C})_{ij} &= \sum_k a_{ik}(\hat{B}\hat{C})_{kj} \\ &= \sum_k \sum_l a_{ik}b_{kl}c_{lj}. \end{aligned} \tag{XXI.1}$$

La traza de este producto se obtiene sumando todos los elementos diagonales,

$$\mathrm{tr}\,(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \sum_i (\hat{A}\hat{B}\hat{C})_{ii} = \sum_i \sum_k \sum_l a_{ik}b_{kl}c_{li}. \tag{XXI.2}$$

Reordenando, queda

$$\mathrm{tr}\,(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \sum_i \sum_l \sum_k c_{li}a_{ik}b_{kl} = \sum_i \sum_l c_{li}(\hat{A}\hat{B})_{il} = \sum_l (\hat{C}\hat{A}\hat{B})_{ll}. \tag{XXI.3}$$

De aquí que

$$\mathrm{tr}\,(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{tr}\,(\hat{C}\hat{A}\hat{B}). \tag{XXI.4}$$

Aplicando este mismo resultado al término de la derecha se obtiene

$$\mathrm{tr}\,(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{tr}\,(\hat{C}\hat{A}\hat{B}) = \mathrm{tr}\,(\hat{B}\hat{C}\hat{A}). \tag{XXI.5}$$

Una simple generalización de este resultado permite concluir que en el cálculo de la traza del producto de un número cualquiera de matrices, se pueden reordenar los factores en orden cíclico sin afectar el resultado.

XXI.2 Demuestre que la condición necesaria y suficiente para que una matriz de densidad describa un estado puro es que los pesos sean solución de la ecuación $w_i^2 - w_i = 0$.

Para que una matriz de densidad represente un estado puro es condición necesaria y suficiente que sea idempotente; en particular, debe cumplir con la condición (T21.38), $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. Escribiendo esta matriz en una representación diagonal,

$$\hat{\rho} = \sum_i w_i \left|i\right\rangle \left\langle i\right| \tag{XXI.6}$$

con $\{|i\rangle\}$ una base ortonormal, de esta condición sigue que

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^2 &= \sum_i \sum_j w_i w_j \left|i\right\rangle \left\langle i \mid j\right\rangle \left\langle j\right| = \sum_i \sum_j w_i w_j \delta_{ij} \left|i\right\rangle \left\langle j\right| \\ &= \sum_i w_i^2 \left|i\right\rangle \left\langle i\right| = \hat{\rho} = \sum_i w_i \left|i\right\rangle \left\langle i\right|, \end{aligned} \tag{XXI.7}$$

es decir,

$$\sum_i \left(w_i^2 - w_i\right) \left|i\right\rangle \left\langle i\right| = 0. \tag{XXI.8}$$

Como los operadores de proyección $|i\rangle \langle i|$ son mutuamente ortogonales, esta condición se puede satisfacer si y sólo si

$$w_i^2 - w_i = 0. \tag{XXI.9}$$

XXI.3 Considere un ensamble estadístico constituido por N estados puros con vector de estado $|k\rangle$ y matriz de densidad $\hat{\rho}_k$, $k = 1, 2, \ldots, N$. Demuestre que la matriz de densidad más general que describe una mezcla de estos estados puede construirse como la matriz de densidad promedio.

Consideremos que los N estados puros $|k\rangle$ pertenecen a una base ortonormal. El vector de estado que describe al sistema se puede escribir en la forma

$$\left|\Psi\right\rangle = \sum_{k=1}^{N} c_k \left|k\right\rangle, \tag{XXI.10}$$

por lo que la matriz de densidad del estado puro correspondiente es

$$\hat{\rho} = \left|\Psi\right\rangle \left\langle\Psi\right| = \sum_{k=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} c_k c_l^* \left|k\right\rangle \left\langle l\right|. \tag{XXI.11}$$

Una mezcla corresponde a una superposición incoherente, y no puede contener los términos de interferencia que aparecen en la expresión (XXI.11), que corresponde a $k \neq l$. Es posible suprimir estos términos suponiendo que las amplitudes c_k son variables aleatorias con promedio nulo y no correlacionadas, de tal manera que se cumple que

$$\overline{c_k} = 0, \quad \overline{c_k c_l^*} = w_k \delta_{kl}. \tag{XXI.12}$$

Si éste es el caso, la matriz de densidad promedio se transforma en

$$\overline{\hat{\rho}} = \overline{\left|\Psi\right\rangle \left\langle\Psi\right|} = \sum_{k=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} \overline{c_k c_l^*} \left|k\right\rangle \left\langle l\right| = \sum_{k=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} w_k \delta_{kl} \left|k\right\rangle \left\langle l\right| = \sum_{k=1}^{N} w_k \left|k\right\rangle \left\langle k\right|, \tag{XXI.13}$$

y describe una mezcla de los estados puros $|k\rangle$ con peso w_k. El promedio sobre la densidad $\overline{\hat{\rho}}$ corresponde ahora a tomar tanto el promedio sobre el estado $|\Psi\rangle$,

como sobre las realizaciones de las amplitudes c_k, siguiendo las reglas (XXI.12), pues estas dos operaciones combinadas conducen, para una variable dinámica genérica $\hat{A}$, a la regla cuántica

$$\overline{\langle\Psi|\,\hat{A}\,|\Psi\rangle} = \sum_{k=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}\overline{c_k c_l^*}\,\langle l|\,\hat{A}\,|k\rangle = \sum_{k=1}^{N} w_k\,\langle k|\,\hat{A}\,|k\rangle = \mathrm{tr}\left(\overline{\hat{\rho}}\hat{A}\right). \qquad \text{(XXI.14)}$$

En otras palabras, $\overline{\hat{\rho}}$ representa la matriz de densidad del sistema. Un ejemplo simple de esta situación se da en el problema XXI.25.

Es oportuno agregar aquí una observación. Consideremos una base arbitraria $\{|\alpha\rangle\}$ y tomemos el elemento de matriz diagonal $\rho_{\alpha\alpha}$, usando la expresión (XXI.13) para la matriz densidad, para obtener

$$\rho_{\alpha\alpha} = \langle\alpha|\,\rho\,|\alpha\rangle = \sum_k w_k\,|c_{k\alpha}|^2\,, \quad c_{k\alpha} = \langle\alpha|\,k\rangle\,.$$

Es claro de este resultado que $\rho_{\alpha\alpha}$ representa la probabilidad del estado $|\alpha\rangle$ contenido en ρ; por esta razón a estas cantidades se les conoce como *poblaciones*. De manera análoga, el elemento de matriz general es

$$\rho_{\alpha\beta} = \langle\alpha|\,\rho\,|\beta\rangle = \sum_k w_k c_{k\alpha} c_{k\beta}^*$$

y describe las interferencias entre los estados $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$, por lo que se les conoce como *coherencias*. Estas coherencias representan el promedio de todos los términos de interferencia entre los estados considerados, calculado sobre los estados contenidos en la mezcla. Si la base $\{|\alpha\rangle\}$ coincide con la base propia $\{|k\rangle\}$ todas las coherencias se anulan, naturalmente.

XXI.4 Demuestre que no existe transformación unitaria alguna que permita escribir la matriz de densidad (T21.46) que describe una mezcla $\hat{\rho} = \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & 1-p \end{pmatrix}$ con $0 < p < 1$, en la forma $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, característica de un estado puro. *Observación*: la demostración no requiere de cálculo alguno.

En el capítulo 9 del texto (y en el problema IX.9) se demuestra que el espectro de un operador permanece invariante cuando se realiza una transformación unitaria. La primera de las dos matrices dadas tiene el espectro p, $1-p$, mientras que el de la segunda es 1, 0. Estos espectros coinciden sólo para $p = 0$ o 1, valores que están excluidos. Por lo tanto, estas matrices no pueden obtenerse una de otra mediante una transformación unitaria.

Otra forma de alcanzar este resultado consiste en notar que el cuadrado de la primera matriz $\hat{\rho}$ es $\begin{pmatrix} p^2 & 0 \\ 0 & (1-p)^2 \end{pmatrix}$, que difiere de $\hat{\rho}$ para $p \neq 0, 1$; luego no es idempotente, como sí lo es la segunda. Puesto que las transformaciones unitarias preservan la propiedad de idempotencia, las dos matrices son inequivalentes.

XXI.5 Precise si los siguientes operadores pueden tomarse como matrices de densidad y si describen o pueden describir, y bajo qué condiciones, estados puros:

$$\hat{\rho}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & ia \\ -ia & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad \hat{\rho}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{1+b^2} & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & \frac{b^2}{1+b^2} \end{pmatrix}, \quad \hat{\rho}_3 = \begin{pmatrix} 0.3 & Zi\beta \\ Zi\beta & 0.7 \end{pmatrix}.$$

Los parámetros a, b, Z, α son reales, pero β puede ser compleja.

Para que pueda ser considerada como un operador de densidad, una matriz debe ser hermitiana, positiva definida y de traza unidad. Si además representa un estado puro debe ser idempotente, y por lo tanto $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. Para responder a las preguntas basta averiguar si las matrices anteriores satisfacen o no estos requisitos.

La adjunta de la matriz $\hat{\rho}_1$ es

$$\hat{\rho}_1^\dagger = \hat{\rho}_1^{T*} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & ia \\ -ia & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \hat{\rho}_1, \tag{XXI.15}$$

y $\hat{\rho}_1$ es hermitiana; también es inmediato que $\mathrm{tr}\hat{\rho}_1 = 1$. Los eigenvalores de esta matriz están dados por las soluciones de la ecuación

$$\left(\frac{1}{2} - \lambda\right)^2 - a^2 = 0, \quad \Rightarrow \lambda = \frac{1}{2} \pm a. \tag{XXI.16}$$

Estas raíces son ambas no negativas para $-1/2 \leq a \leq 1/2$. Como se discute en la sección 21.2 del texto, los valores propios de una matriz de densidad juegan el papel de pesos estadísticos del correspondiente estado en el ensamble, por lo que deben estar comprendidos en $[0, 1]$. De esta consideración sigue que sólo si la condición $|a| \leq 1/2$ se cumple, $\hat{\rho}_1$ puede tomarse como una matriz de densidad. Por otra parte,

$$\hat{\rho}_1^2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} + a^2 & ia \\ -ia & \frac{1}{4} + a^2 \end{pmatrix}. \tag{XXI.17}$$

Vemos que únicamente para $a = 1/2$ se cumple que $\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_1^2$ y que describe un estado puro.

Para $\hat{\rho}_2$, con α y b números reales, también se cumple que

$$\hat{\rho}_2^\dagger = \begin{pmatrix} \frac{1}{1+b^2} & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & \frac{b^2}{1+b^2} \end{pmatrix} = \hat{\rho}_2, \quad \mathrm{tr}\,\hat{\rho}_2 = 1. \tag{XXI.18}$$

Los eigenvalores de esta matriz están dados por las soluciones de la ecuación

$$\left(\frac{1}{1+b^2} - \lambda\right)\left(\frac{b^2}{1+b^2} - \lambda\right) - 1 = 0. \tag{XXI.19}$$

Un poco de álgebra muestra que ambas raíces son no negativas sólo si se cumple que

$$b^4 + b^2 + 1 \leq 0. \tag{XXI.20}$$

Como esto no puede ser cierto para b real, $\hat{\rho}_2$ no representa una matriz de densidad para ningún valor real de b.

La matriz $\hat{\rho}_3$ es hermitiana sólo si $-Zi\beta^* = Zi\beta$, es decir, si $\beta^* = -\beta$ por lo que β tiene que ser de la forma

$$\beta = ib, \tag{XXI.21}$$

con b un número real. En este caso la matriz resultante

$$\hat{\rho}_3 = \begin{pmatrix} 0.3 & -Zb \\ -Zb & 0.7 \end{pmatrix} \tag{XXI.22}$$

es de traza unidad y sus valores propios son las raíces de la ecuación

$$(0.3 - \lambda)(0.7 - \lambda) - Z^2 b^2 = 0, \tag{XXI.23}$$

las que son no negativas cuando

$$Z^2 b^2 \leq 0.21. \tag{XXI.24}$$

Si además pedimos que la matriz sea idempotente, deberán cumplirse las condiciones

$$0.09 + (Zb)^2 = 0.3, \tag{XXI.25}$$
$$0.049 + (Zb)^2 = 0.7. \tag{XXI.26}$$

Como la diferencia de estas dos ecuaciones conduce a una contradicción, $\hat{\rho}_3$ no corresponde a un estado puro.

XXI.6 Un sistema físico puede encontrarse en dos estados independientes. Muestre que la matriz de densidad más general que describe esta situación tiene la forma

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} a & be^{i\varphi} \\ be^{-i\varphi} & 1-a \end{pmatrix}.$$

Determine los requisitos que deben satisfacer a y b en general, y bajo qué condiciones el estado descrito es puro.

Los dos estados independientes, es decir, ortonormales, en que el sistema puede encontrarse los denotamos como $|1\rangle$ y $|2\rangle$. Usando como base de este espacio los vectores

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{XXI.27}$$

y llamando w_1 y w_2 a las probabilidades relativas de los estados 1 y 2, el operador de densidad se escribe como

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= w_1 |1\rangle\langle 1| + w_2 |2\rangle\langle 2| \\ &= w_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} + w_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= w_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + w_2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 & 0 \\ 0 & w_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{XXI.28}$$

Esta $\hat{\rho}$ está en su propia representación; para pasar a una representación arbitraria basta hacer una transformación unitaria, con lo que la matriz deja de ser diagonal, pero preserva su carácter de hermitiana. Como la traza es invariante frente a la transformación unitaria, la nueva matriz tendrá la misma traza, $\mathrm{tr}\hat{\rho} = w_1 + w_2 = 1$. Por lo tanto, el resultado de la operación tendrá la forma general

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} a & \beta \\ \beta^* & 1-a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & be^{i\varphi} \\ be^{-i\varphi} & 1-a \end{pmatrix}, \tag{XXI.29}$$

donde hemos escrito el número complejo β en términos de su magnitud y fase, $\beta = be^{i\varphi}$.

Una forma alternativa de llegar a este resultado se obtiene de considerar que, tratándose de un espacio de Hilbert bidimensional, el operador más general se puede escribir en términos de las tres matrices de Pauli y la matriz unidad (como

se discute en el problema XII.17), por lo que podemos poner, con la notación usada en las ecuaciones (T12.110),

$$\hat{\rho} = \alpha_0 \mathbb{I} + \alpha_+ \hat{\sigma}_+ + \alpha_- \hat{\sigma}_- + \alpha_3 \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} \alpha_0 + \alpha_3 & \sqrt{2}\alpha_+ \\ \sqrt{2}\alpha_- & \alpha_0 - \alpha_3 \end{pmatrix}. \tag{XXI.30}$$

Las condiciones sobre la traza y de hermiticidad dan, con $\alpha_3 = a - 1/2$,

$$a = \alpha_0 + \alpha_3, \quad \alpha_0 - \alpha_3 = 1 - a, \quad \alpha_- = \alpha_+^*, \quad \alpha_0 = \frac{1}{2}, \tag{XXI.31}$$

con lo que se recupera el resultado anterior.

Los parámetros a y b no son enteramente arbitrarios, pues los eigenvalores de la matriz $\hat{\rho}$ deben ser no negativos. Para obtener las restricciones correspondientes, observamos que de la ecuación característica

$$(a - \lambda)(1 - a - \lambda) - b^2 = 0 \tag{XXI.32}$$

que determina los valores propios sigue que éstos serán no negativos si se cumple que

$$a^2 + b^2 \leq a. \tag{XXI.33}$$

Naturalmente, esta condición la cumple la matriz escrita en su forma diagonal original, ecuación (XXI.28), pues en este caso $a = w_1$, $b = 0$ y la condición se reduce a $w_1^2 \leq w_1$, es decir, $w_1 \leq 1$, como corresponde a un peso estadístico.

Para que la matriz (XXI.29) (que cumple con (XXI.33)) describa un estado puro debe ser idempotente, lo que demanda que

$$\hat{\rho}^2 = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & be^{i\varphi} \\ be^{-i\varphi} & b^2 + (1-a)^2 \end{pmatrix} = \hat{\rho} = \begin{pmatrix} a & be^{i\varphi} \\ be^{-i\varphi} & 1 - a \end{pmatrix}, \tag{XXI.34}$$

de donde se obtienen las condiciones

$$a^2 + b^2 = a \tag{XXI.35}$$

y

$$b^2 + (1-a)^2 = 1 - a. \tag{XXI.36}$$

Simplificando la segunda de estas expresiones se comprueba que es igual a la primera, la que a su vez es compatible con (XXI.33), como es de esperarse; lo interesante es que representa precisamente el caso límite.

XXI.7 Demuestre que los operadores $\hat{\Lambda}_n^{\pm} = (1 \pm \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})/2$ son idempotentes y mutuamente ortogonales, es decir, que son operadores de proyección. Estudie su acción sobre una matriz de densidad, tanto para estados puros como para mezclas.

El cuadrado de $\hat{\Lambda}_n^{\pm}$ es

$$\left(\hat{\Lambda}_n^{\pm}\right)^2 = \frac{1}{4}(1 \pm \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 = \frac{1}{4}\left[1 \pm 2\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}} + (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2\right]. \tag{XXI.37}$$

En el problema XII.20 se demostró que $(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 = 1$; usando este resultado queda

$$\left(\hat{\Lambda}_n^{\pm}\right)^2 = \frac{1}{2}(1 \pm \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}}),$$

es decir, ambas matrices son idempotentes:

$$\left(\hat{\Lambda}_n^{\pm}\right)^2 = \hat{\Lambda}_n^{\pm}. \tag{XXI.38}$$

Es también inmediato mostrar que son mutuamente ortogonales:

$$\hat{\Lambda}_n^{+}\hat{\Lambda}_n^{-} = \hat{\Lambda}_n^{-}\hat{\Lambda}_n^{+} = \frac{1}{4}\left(1+\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{n}}\right)\left(1-\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{n}}\right) = \frac{1}{4}\left[1-\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{n}}\right)^2\right] = 0. \tag{XXI.39}$$

En el problema XII.20 también se obtuvo que $\mathrm{tr}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{n}}\right) = 0$. De aquí sigue que

$$\mathrm{tr}\,\hat{\Lambda}_n^{\pm} = \frac{1}{2}\mathrm{tr}\,\mathbb{I} = 1. \tag{XXI.40}$$

Puesto que $\hat{\Lambda}_n^{+}$ y $\hat{\Lambda}_n^{-}$ son operadores hermitianos, idempotentes, de traza 1 y ortogonales, ambos son operadores de proyección. Como la forma diagonal de estas matrices es (con $\hat{\mathbf{n}}$ en la dirección Oz)

$$\hat{\Lambda}_z^{\pm} = \frac{1}{2}\left(1\pm\hat{\sigma}_3\right) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{XXI.41}$$

sus valores propios son 0 y 1, como corresponde a proyectores. De manera particular, como $\hat{\Lambda}_z^{+}$ y $\hat{\Lambda}_z^{-}$ operan en un espacio de Hilbert bidimensional, se les puede tomar como los operadores de proyección de espín $1/2$ en la dirección $\hat{\mathbf{n}}$.

Para estudiar la acción de estos operadores sobre una matriz de densidad, consideramos el caso de un mezcla representada por el operador (XXI.28). Tenemos, por ejemplo, con $\hat{\mathbf{n}} = (n_1, n_2, n_3)$, $n_1 \pm i n_2 = n_0 e^{\pm i\gamma}$ y $w_2 = 1 - w_1$,

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}_n^{+}\hat{\rho} &= \frac{1}{2}\left(1+\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{n}}\right)\begin{pmatrix} w_1 & 0 \\ 0 & w_2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+n_3 & n_0 e^{-i\gamma} \\ n_0 e^{+i\gamma} & 1-n_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} w_1 & 0 \\ 0 & 1-w_1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+n_3)w_1 & \frac{1}{2}n_0 w_2 e^{-i\gamma} \\ \frac{1}{2}n_0 w_1 e^{i\gamma} & \frac{1}{2}(1-n_3)w_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{XXI.42}$$

El caso $\hat{\Lambda}_n^{-}\hat{\rho}$ es similar y se obtiene del resultado anterior con la substitución $\hat{\mathbf{n}} \to -\hat{\mathbf{n}}$, es decir, $n_3 \to -n_3, \gamma \to -\gamma$. Para ver con más claridad el significado del resultado anterior, consideremos el caso $n_0 = 0$, $n_3 = 1$, o sea, $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{n}}_z = \hat{\mathbf{k}}$. De (XXI.42) sigue para estos valores

$$\hat{\Lambda}_3^{+}\hat{\rho} = \begin{pmatrix} w_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{XXI.43}$$

es decir, el operador $\hat{\Lambda}_3^{+}$ ha suprimido los estados con espín hacia abajo, dejando sin modificación a los que poseen el espín hacia arriba. Ésta es precisamente la acción que cabría esperar del operador $\hat{\Lambda}_3^{+}$, pues se sabe que

$$\hat{\Lambda}_3^{+}\left|1\right\rangle = \frac{1}{2}\left(1+\hat{\sigma}_3\right)\left|1\right\rangle = \left|1\right\rangle, \quad \hat{\Lambda}_3^{+}\left|2\right\rangle = 0. \tag{XXI.44}$$

El caso de los estados puros es análogo y bastaría tomar $w_1 = 1$ en el ejemplo anterior. Una diferencia interesante entre ambos casos es que, mientras que $\hat{\Lambda}_3^{+}\hat{\rho}$ dado por la ecuación (XXI.43) con $w_1 < 1$ *no*es una matriz de densidad (por ejemplo, su traza es menor que la unidad), sí lo es en el caso del estado puro. Esto es claro, puesto que para $w_1 < 1$, $\hat{\Lambda}_3^{+}\hat{\rho}$ representa sólo una parte del ensamble, al dejar de lado a los miembros del ensamble con espín hacia abajo.

XXI.8 Construya el operador de densidad y el vector de polarización que corresponden al estado puro descrito por el espinor $\begin{pmatrix} \sqrt{1/3} \\ \sqrt{2/3} \end{pmatrix}$.

En términos de la base

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{XXI.45}$$

el estado puro representado por el espinor propuesto se escribe como

$$|p\rangle \equiv \begin{pmatrix} \sqrt{1/3} \\ \sqrt{2/3} \end{pmatrix} = \sqrt{1/3}\,|+\rangle + \sqrt{2/3}\,|-\rangle\,. \tag{XXI.46}$$

Su matriz de densidad se construye utilizando la ecuación (T21.36), y es

$$\hat{\rho} = |p\rangle\,\langle p| = \begin{pmatrix} \sqrt{1/3} \\ \sqrt{2/3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{1/3} & \sqrt{2/3} \end{pmatrix} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 2 \end{pmatrix}. \tag{XXI.47}$$

Puesto que se trata de un estado puro, esta matriz debe ser idempotente, y en efecto,

$$\hat{\rho}^2 = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} 3 & 3\sqrt{2} \\ 3\sqrt{2} & 6 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 2 \end{pmatrix} = \hat{\rho}. \tag{XXI.48}$$

Por otro lado, en la sección 21.5 del texto se muestra que la matriz de densidad puede escribirse en términos del vector de polarización $\hat{\mathbf{P}}$ en la forma

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(\mathbb{I} + \hat{\mathbf{P}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+P_3 & P_1 - iP_2 \\ P_1 + iP_2 & 1-P_3 \end{pmatrix}. \tag{XXI.49}$$

Comparando (XXI.47) y (XXI.49) sigue que deben cumplirse las relaciones

$$\frac{1}{2}(1+P_3) = \frac{1}{3}, \qquad \frac{1}{2}(1-P_3) = \frac{2}{3}; \tag{XXI.50}$$

$$\frac{1}{2}(P_1 - iP_2) = \frac{\sqrt{2}}{3}, \qquad \frac{1}{2}(P_1 + iP_2) = \frac{\sqrt{2}}{3}. \tag{XXI.51}$$

De aquí sigue que las componentes del vector de polarización son

$$P_1 = \frac{2\sqrt{2}}{3}, \quad P_2 = 0, \quad P_3 = -\frac{1}{3}; \tag{XXI.52}$$

es decir, el vector de polarización es

$$\mathbf{P} = \left(\frac{2\sqrt{2}}{3},\, 0,\, -\frac{1}{3}\right). \tag{XXI.53}$$

Este vector se encuentra en el plano xOz y su magnitud es $P^2 = 1$. Esto último era de esperarse, pues todo estado puro de espín $1/2$ está totalmente polarizado en alguna dirección, como se demuestra en la sección 21.5 del texto.

XXI.9 Un sistema físico puede encontrarse en tres estados $|1\rangle, |2\rangle$ y $|3\rangle$ con probabilidades $1/2$, $3/8$, $1/8$, respectivamente. Construya la matriz de densidad correspondiente. ¿Cuántas condiciones adicionales se pueden imponer?

Consideraremos que los tres estados en cuestión son ortogonales y escribimos

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{XXI.54}$$

Si el estado en cuestión es puro, su forma más general consistente con las probabilidades dadas la podemos caracterizar con el vector

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = a\,|1\rangle + b\,|2\rangle + c\,|3\rangle\,, \tag{XXI.55}$$

con

$$|a|^2 = \frac{1}{2}, \quad |b|^2 = \frac{3}{8}, \quad |c|^2 = \frac{1}{8}, \tag{XXI.56}$$

es decir,

$$a = \sqrt{\frac{1}{2}}\,e^{i\alpha}, \quad b = \sqrt{\frac{3}{8}}\,e^{i\beta}, \quad c = \sqrt{\frac{1}{8}}\,e^{i\gamma} \tag{XXI.57}$$

con α, β, γ reales. La matriz de densidad que describe este estado es

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^* & b^* & c^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} aa^* & ab^* & ac^* \\ ba^* & bb^* & bc^* \\ ca^* & cb^* & cc^* \end{pmatrix}. \tag{XXI.58}$$

Una de las fases α, β, γ puede fijarse arbitrariamente (se absorbe en la constante de normalización). Las otras dos quedan como parámetros libres, lo que significa que podemos imponer aún dos condiciones (en conexión con esto, véase el ejercicio XXI.33). Por ejemplo, consideremos el caso con a, b y c reales y positivas, o sea $a = 1/\sqrt{2}$, $b = \sqrt{3/8}$, $c = 1/\sqrt{8}$; $\hat{\rho}$ toma la forma

$$\hat{\rho} = \frac{1}{8}\begin{pmatrix} 4 & 2\sqrt{3} & 2 \\ 2\sqrt{3} & 3 & \sqrt{3} \\ 2 & \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}. \tag{XXI.59}$$

Esta matriz satisface naturalmente las condiciones que corresponden a un estado puro, $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$, $\mathrm{tr}\hat{\rho} = 1$, $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$.

Por otro lado, si el estado correspondiente es una mezcla, la matriz de densidad es

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\,|1\rangle\langle 1| + \frac{3}{8}\,|2\rangle\langle 2| + \frac{1}{8}\,|3\rangle\langle 3| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{8} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{pmatrix}. \tag{XXI.60}$$

Esta expresión no contiene parámetros libres y no hay lugar para condiciones adicionales.

XXI.10 Repita los argumentos del texto con las modificaciones pertinentes, para derivar detalladamente la distribución de Planck con la contribución del punto cero, ecuación (T21.60).

Incluyendo la energía del punto cero, el hamiltoniano de un oscilador armónico de frecuencia ω es

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right). \tag{XXI.61}$$

Consideremos un conjunto estadístico de estos osciladores en equilibrio a temperatura T; la matriz de densidad que describe este ensamble está dada por la ecuación (T21.50), y es, con $\beta = 1/k_BT$,

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{\operatorname{tr} e^{-\beta\hat{H}}}. \tag{XXI.62}$$

La energía media de los osciladores, promediada sobre esta distribución, es

$$\langle E\rangle = \operatorname{tr}\hat{\rho}\hat{H} = \hbar\omega\frac{\sum_{n=0}^{\infty}\left\langle n \mid e^{-\beta\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1/2\right)}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right) \mid n\right\rangle}{\sum_{n=0}^{\infty}\left\langle n \mid e^{-\beta\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1/2\right)} \mid n\right\rangle}. \tag{XXI.63}$$

Como los eigenestados del hamiltoniano son también eigenestados del operador de número $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|n\rangle = n\,|n\rangle$ (ecuación (T11.46)), se tiene

$$e^{-\beta\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1/2\right)}\,|n\rangle = e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)}\,|n\rangle\,,$$

relación que insertada en la ecuación (XXI.63) da

$$\langle E\rangle = \hbar\omega\frac{\sum_{n=0}^{\infty}\left\langle n \mid (n+\frac{1}{2})e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} \mid n\right\rangle}{\sum_{n=0}^{\infty}\left\langle n \mid e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} \mid n\right\rangle} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z, \tag{XXI.64}$$

donde la función de partición Z está dada por la progresión geométrica

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} = e^{-\beta\hbar\omega/2}\sum_{n=0}^{\infty}(e^{-\beta\hbar\omega})^n \\ &= \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{e^{\beta\hbar\omega/2}}{e^{\beta\hbar\omega}-1}. \end{aligned} \tag{XXI.65}$$

Sustituyendo en (XXI.64) se obtiene

$$\begin{aligned} \langle E\rangle &= -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\right) \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT}-1} = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\frac{e^{\hbar\omega/2kT}+e^{-\hbar\omega/2kT}}{e^{\hbar\omega/2kT}-e^{-\hbar\omega/2kT}}\right). \end{aligned} \tag{XXI.66}$$

Así pues, si se incluye la energía del punto cero de cada oscilador elemental, la distribución de Planck adquiere a su vez una contribución adicional atérmica:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT}-1} = \frac{1}{2}\hbar\omega\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right). \tag{XXI.67}$$

XXI.11 Calcule $\left\langle x^2\right\rangle$ para el ensamble canónico de osciladores armónicos de espín entero en equilibrio termodinámico a temperatura T. Demuestre que se satisface el teorema del virial

$$\left\langle\hat{V}\right\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2\left\langle x^2\right\rangle = \frac{1}{2}\langle E\rangle\,.$$

Dado que consideramos un ensamble canónico de osciladores armónicos de espín entero, podemos utilizar los resultados aplicables a sistemas de bosones. Las reglas de conmutación para los operadores de creación y aniquilación de bosones son

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad [\hat{a}, \hat{a}] = 0, \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0, \tag{XXI.68}$$

pues con ellas los operadores de número $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ tienen valores propios $0, 1, 2, 3, \ldots$ Estas reglas coinciden con las de los osciladores considerados en el problema anterior, por lo que los resultados obtenidos ahí son aplicables en el presente caso. Con el hamiltoniano, la matriz de densidad de la distribución canónica y la función de partición dados por las ecuaciones (XXI.61), (XXI.62) y (XXI.65), respectivamente, el valor esperado del cuadrado de la posición es

$$\begin{aligned} \left\langle x^2 \right\rangle &= \operatorname{tr} \hat{\rho} x^2 \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \left\langle n \mid e^{-\beta\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1/2\right)} \left(1 + \hat{a}\hat{a} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\right) \mid n \right\rangle}{\sum_{n=0}^{\infty} \left\langle n \mid e^{-\beta\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1/2\right)} \mid n \right\rangle}, \end{aligned} \tag{XXI.69}$$

donde se escribió

$$x^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \left(1 + \hat{a}\hat{a} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\right). \tag{XXI.70}$$

Utilizando las igualdades

$$\begin{gathered} e^{-\beta\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1/2\right)} |n\rangle = e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} |n\rangle, \\ \langle n| \hat{a}\hat{a} |n\rangle = 0, \quad \langle n| \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger |n\rangle = 0, \quad \langle n| \hat{a}^\dagger\hat{a} |n\rangle = n, \end{gathered}$$

se obtiene

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2}\right) e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)}} = -\frac{1}{m\omega^2} \frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z = \frac{1}{m\omega^2} \langle E \rangle, \tag{XXI.71}$$

donde $\langle E \rangle$ está dado por (XXI.67). Se obtiene así

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right). \tag{XXI.72}$$

De (XXI.72) sigue que para un oscilador del ensamble se cumple que

$$\left\langle \hat{V} \right\rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \left\langle x^2 \right\rangle = \frac{1}{4} \hbar\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) = \frac{1}{2} \langle E \rangle, \tag{XXI.73}$$

es decir, se satisface el teorema del virial para el oscilador armónico, $\left\langle \hat{V} \right\rangle = \left\langle \hat{T} \right\rangle = \frac{1}{2} \langle E \rangle$.

Si consideramos un sistema compuesto por N osciladores independientes, la función de partición resulta

$$Z = Z_1^N, \tag{XXI.74}$$

donde Z_1 es la función canónica de un oscilador, ecuación (XXI.65); de aquí sigue que

$$\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z = N \frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z_1, \tag{XXI.75}$$

por lo que

$$\langle E \rangle = N \langle E_1 \rangle , \tag{XXI.76}$$

$$\langle x^2 \rangle = N \langle x_1^2 \rangle , \tag{XXI.77}$$

etc., y el teorema del virial se sigue satisfaciendo.[1]

XXI.12 En el problema ilustrativo 15.1 del texto se calculó el momento paramagnético de un átomo. Partiendo de los resultados obtenidos ahí y suponiendo que el sistema se encuentra en equilibrio a temperatura $T > 0$, demuestre que

$$\langle \mu_{\text{param}} \rangle = \frac{\mu_0^2 g^2}{3kT} j(j+1)B.$$

De este resultado sigue por simple derivación la fórmula (4) del problema ilustrativo 15.1 del texto. Considere sólo el caso de campo débil, para el cual $\mu_0 B/kT \ll 1$. *Observación*: $\sum_{m_j} m_j^2 = \frac{1}{3} j(j+1)(2j+1)$.

Del problema ilustrativo 15.1 del texto y del problema XIII.19 sabemos que la energía media adicional adquirida por un átomo al estar inmerso en un campo magnético homogéneo es

$$\Delta E_{\text{mag}} = \mu_0 g B m_j + \frac{e^2 B^2}{12mc^2} \langle r^2 \rangle . \tag{XXI.78}$$

De aquí sigue para el momento magnético de este átomo

$$\mu = -\frac{\partial \Delta E_{\text{mag}}}{\partial B} = -\mu_0 g m_j - \frac{e^2 B}{6mc^2} \langle r^2 \rangle . \tag{XXI.79}$$

Para campos magnéticos no muy intensos y temperaturas suficientemente altas, de manera que $\mu_0 B/kT \ll 1$, el término de la energía cuadrático en B que da lugar a los efectos diamagnéticos resulta despreciable y basta quedarse con las expresiones

$$\Delta E_{\text{mag}} = \mu_0 g B m_j , \quad \mu \equiv -\mu_0 g m_j . \tag{XXI.80}$$

Consideremos estos átomos como miembros de un ensamble canónico en equilibrio, cuyo operador de densidad está dado por la ecuación (XXI.62). Para calcular el valor esperado del momento magnético sobre este ensamble tenemos que promediar sobre todos los posibles valores que m_j puede tomar para una j dada, que van desde $-j$ hasta $+j$. Como la parte no magnética del hamiltoniano es independiente de esta proyección, se le puede extraer del signo de suma tanto en el numerador como en el denominador, por lo que se cancela, con lo que la expresión de interés se reduce a

$$\langle \mu \rangle = \frac{-\sum_{m_j} \mu_0 g m_j e^{-\beta \mu_0 B g m_j}}{\sum_{m_j} e^{-\beta \mu_0 B g m_j}} . \tag{XXI.81}$$

Puesto que por hipótesis $\mu_0 B \beta \ll 1$, podemos aproximar consistentemente el exponencial con un desarrollo que incluya hasta el término proporcional a B, lo

[1] Mayores detalles pueden obtenerse en F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*(McGraw-Hill, Nueva York, 1965), secciones 7.6 y 7.7.

que da

$$\begin{aligned}\langle\mu\rangle &= -\frac{\sum_{m_j}\mu_0 g m_j(1-\beta\mu_0 B g m_j)}{\sum_{m_j}(1-\beta\mu_0 B g m_j)} \\ &= -\frac{\mu_0 g\sum_{m_j} m_j - \mu_0^2 g^2 B\beta\sum_{m_j} m_j^2}{\sum_{m_j} 1-\beta\mu_0 B g\sum_{m_j} m_j}. \qquad \text{(XXI.82)}\end{aligned}$$

Tomando en cuenta que

$$\sum_{m_j=-j}^{j} m_j = 0, \quad \sum_{m_j=-j}^{j} 1 = 2j+1, \quad \sum_{m_j=-j}^{j} m_j^2 = \frac{1}{3}j\,(j+1)\,(2j+1)\,,$$

queda

$$\langle\mu_{\text{param}}\rangle = \frac{\mu_0^2 g^2}{3kT} j\,(j+1)\,B. \qquad \text{(XXI.83)}$$

El momento (para)magnético se escribe en términos de la susceptibilidad (para)-magnética en la forma

$$\langle\mu\rangle = \chi_{\text{param}}\,\langle B\rangle \qquad \text{(XXI.84)}$$

(en el caso presente debemos poner $\langle B\rangle = B$), por lo que, comparando, se obtiene

$$\chi_{\text{param}} = \frac{\mu_0^2 g^2}{3kT} j\,(j+1)\,, \qquad \text{(XXI.85)}$$

que es la *fórmula de Curie-Langevin*, ecuación (4) del problema ilustrativo 15.1 del texto.[2] El presente cálculo difiere del presentado en la nota al pie en ese lugar sólo por el factor $-B$ que distingue la energía magnética media del momento magnético medio.

XXI.13 Demuestre que las ecuaciones (T21.67) y (T21.72) son equivalentes.

Las ecuaciones del texto referidas son dos expresiones para la matriz de densidad de un ensamble canónico de osciladores armónicos en la representación de coordenadas. Específicamente, la ecuación (T21.67) es la aplicación a los osciladores de la fórmula general (T21.72),

$$\rho(x,x';\beta) = \frac{1}{Z}\sum_n e^{-\beta E_n}\varphi_n(x)\varphi_n^*(x'), \qquad \text{(XXI.86)}$$

con $\varphi_n(x)$, E_n las eigenfunciones y eigenvalores del hamiltoniano del problema en cuestión.

Para el oscilador armónico debemos tomar

$$\varphi_n\,(\xi) = C_n e^{-\xi^2/2} H_n\,(\xi)\,, \quad E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \qquad \text{(XXI.87)}$$

con

$$x = \alpha_0\xi, \quad C_n = \left(\sqrt{\pi}\alpha_0 2^n n!\right)^{-1/2}. \qquad \text{(XXI.88)}$$

[2]Para un cálculo más preciso puede consultarse la sección 7.8 del libro de Reif anteriormente citado.

De aquí sigue que la ecuación (XXI.86) puede escribirse en la forma

$$\rho\left(\xi,\xi';\beta\right)=\frac{1}{Z}e^{-\beta\hbar\omega/2}e^{-\left(\xi^2+\xi'^2\right)/2}\sum_n\frac{\left(e^{-\beta\hbar\omega}\right)^n}{\sqrt{\pi}\alpha_0 2^n n!}H_n\left(\xi\right)H_n\left(\xi'\right). \tag{XXI.89}$$

La suma se puede evaluar con ayuda de la fórmula[3]

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{2^n n!}H_n(\xi)H_n(\xi')=\left(1-x^2\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{2\xi\xi' x-\left(\xi^2+\xi'^2\right)x^2}{1-x^2}\right], \tag{XXI.90}$$

poniendo $x=e^{-\beta\hbar\omega}$, lo que da

$$\rho\left(\xi,\xi';\beta\right)=\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{\sqrt{\pi}\alpha_0 Z}\frac{e^{-\left(\xi^2+\xi'^2\right)/2}}{\sqrt{1-e^{-2\beta\hbar\omega}}}\exp\left[\frac{-\left(\xi^2+\xi'^2\right)e^{-2\beta\hbar\omega}-2\xi\xi' e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-2\beta\hbar\omega}}\right]. \tag{XXI.91}$$

Esta expresión puede reescribirse como

$$\begin{aligned}\rho(\xi,\xi';\beta)&=\frac{1}{\sqrt{\pi\alpha_0^2 Z}}\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{\sqrt{1-e^{-2\beta\hbar\omega}}}\\&\quad\times\exp\left[\frac{-\frac{1}{2}\left(\xi^2+\xi'^2\right)\left(1-e^{-2\beta\hbar\omega}\right)-\left(\xi^2+\xi'^2\right)e^{-2\beta\hbar\omega}+2\xi\xi' e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-2\beta\hbar\omega}}\right]\\&=\frac{1}{\sqrt{\pi\alpha_0^2 Z}}\frac{1}{\sqrt{e^{\beta\hbar\omega}-e^{-\beta\hbar\omega}}}\\&\quad\times\exp\left[\frac{-\frac{1}{2}\left(\xi^2+\xi'^2\right)\left(1+e^{-2\beta\hbar\omega}\right)+2\xi\xi' e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-2\beta\hbar\omega}}\right]\\&=\frac{1}{Z\sqrt{2\pi\alpha_0^2\operatorname{senh}\beta\hbar\omega}}\exp\left[\frac{-\frac{1}{2}\left(\xi^2+\xi'^2\right)\left(e^{\beta\hbar\omega}+e^{-\beta\hbar\omega}\right)+2\xi\xi'}{e^{\beta\hbar\omega}-e^{-\beta\hbar\omega}}\right],\end{aligned} \tag{XXI.92}$$

o sea,

$$\rho(\xi,\xi';\beta)=\frac{1}{Z\sqrt{2\pi\alpha_0^2\operatorname{senh}\beta\hbar\omega}}\exp\left[\frac{-\left(\xi^2+\xi'^2\right)\cosh\beta\hbar\omega+2\xi\xi'}{2\operatorname{senh}\beta\hbar\omega}\right]. \tag{XXI.93}$$

Ésta es la matriz de densidad que describe el ensamble de equilibrio de los osciladores armónicos en la representación de coordenadas. Para darle la forma que corresponde a la ecuación (T21.67) basta hacer el cambio de variable

$$z=\frac{1}{2}\beta\hbar\omega=\frac{\hbar\omega}{2kT} \tag{XXI.94}$$

y pasar a la matriz de densidad no normalizada (ecuación (T21.62))

$$\rho_B=Z\rho=e^{-\beta\hat{H}}, \tag{XXI.95}$$

con lo cual se obtiene

$$\rho_B\left(\xi,\xi';\beta\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_0^2\operatorname{senh}2z}}\exp\left[\frac{-\left(\xi^2+\xi'^2\right)\cosh 2z+2\xi\xi'}{2\operatorname{senh}2z}\right], \tag{XXI.96}$$

[3]Lebedev (1972), sección 4.11; P. M. Morse, *Methods of Theoretical Physics*(McGraw-Hill, 1953), problema 6.12.

que es precisamente la ecuación (T21.67), verificándose la equivalencia entre esta ecuación y la (T21.72).

XXI.14 Construya la solución de la ecuación (T21.66) con el método esbozado en el texto.

Derivando con respecto a β la expresión (T21.48)

$$\hat{\rho}_B = e^{-\beta \hat{H}} \tag{XXI.97}$$

que da la matriz de densidad no normalizada que describe un ensamble canónico de osciladores, se obtiene la ecuación de Bloch

$$\frac{\partial \hat{\rho}_B}{\partial \beta} = -\hat{H}\hat{\rho}_B. \tag{XXI.98}$$

Esta ecuación, que sustituye a la ecuación estacionaria de Schrödinger, incluye la información del comportamiento cuántico, más el requerimiento de que se trata de una distribución canónica. En particular, para un oscilador armónico con hamiltoniano ($\xi = x/\alpha_0$, $\alpha_0^2 = \hbar/m\omega$)

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\hat{p}_\xi^2 + \xi^2\right) \tag{XXI.99}$$

e introduciendo la variable adimensional z dada por

$$z = \frac{1}{2}\hbar\omega\beta = E_0\beta = \frac{\hbar\omega}{2kT}\ , \tag{XXI.100}$$

la ecuación de Bloch en la representación de coordenadas toma la forma

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial \beta} = \frac{\partial^2 \rho_B}{\partial \xi^2} - \xi^2 \hat{\rho}_B, \tag{XXI.101}$$

que es precisamente la ecuación (T21.66) a resolver.

Como condición inicial se tiene

$$\rho_B = \delta(x - x') = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\delta(\xi - \xi') \qquad \text{para } z = 0. \tag{XXI.102}$$

Para z pequeña, es decir, para altas temperaturas, las partículas se comportan prácticamente como libres, pues su energía cinética probable es muy alta; en este límite la matriz de densidad para el oscilador armónico debe tomar la forma (véase el problema XXI.16)[4]

$$\rho_B\left(\xi, \xi', z\right) \approx \sqrt{\frac{m\omega}{4\pi\hbar z}} e^{-(\xi-\xi')^2/4z}. \tag{XXI.103}$$

Esta observación sugiere que busquemos una solución de (XXI.101) de la forma

$$\rho_B = \exp\left[-a(z)\xi^2 - b(z)\xi - c(z)\right]. \tag{XXI.104}$$

Sustituyendo esta expresión en (XXI.101) se llega a

$$a'\xi^2 + b'\xi + c' = \left(1 - 4a^2\right)\xi^2 - 4ab\xi + 2a - b^2, \tag{XXI.105}$$

[4]Esto es cierto sólo para $\xi \neq \xi'$; cuando son iguales, $\rho_B(\xi, \xi', z)$ es igual a $\rho_{B\,\text{libre}}$ sólo para $z = 0$.

donde la prima indica derivación respecto a z. De aquí sigue

$$a' = 1 - 4a^2, \quad b' = -4ab, \quad c' = 2a - b^2. \tag{XXI.106}$$

Integrando la primera de estas ecuaciones se obtiene

$$a = \frac{1}{2}\coth 2(z - z_0).$$

La condición inicial (XXI.103) requiere que la constante de integración z_0 desaparezca, y queda

$$a = \frac{1}{2}\coth 2z. \tag{XXI.107}$$

Con esto las restantes ecuaciones (XXI.106) conducen a

$$b = \frac{A}{\operatorname{senh} 2z}, \tag{XXI.108}$$

$$c = \frac{1}{2}\ln(\operatorname{senh} 2z) + \frac{1}{2}A^2 \coth 2z - \ln B, \tag{XXI.109}$$

con A y B constantes a determinar con ayuda de la condición inicial. Sustituyendo en (XXI.104) se obtiene

$$\rho_B = \frac{B}{\sqrt{\operatorname{senh} 2z}} \exp\left[-\frac{1}{2}\xi^2 \coth 2z - \frac{A\xi}{\operatorname{senh} 2z} - \frac{1}{2}A^2 \coth 2z\right]. \tag{XXI.110}$$

En el límite $z \to 0$ esta expresión se reduce a

$$\rho_B \to \frac{B}{\sqrt{2z}} \exp\left[-\frac{\xi^2 + 2A\xi + A^2}{4z}\right], \tag{XXI.111}$$

y comparando con (XXI.104) se obtiene

$$A = -\xi', \quad B = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar}},$$

con lo cual queda

$$\rho_B = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_0^2 \operatorname{senh} 2z}} \exp\left[-\frac{\left(\xi^2 + \xi'^2\right)\cosh 2z - 2\xi\xi'}{2\operatorname{senh} 2z}\right], \tag{XXI.112}$$

que es la ecuación (T21.67) que había que demostrar.

La distribución espacial de equilibrio de los osciladores se obtiene poniendo $\xi = \xi'$, y de esto resulta una gaussiana centrada en el origen, de anchura dependiente de la temperatura:

$$\rho_B = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_0^2 \operatorname{senh} 2z}} \exp\left(-\xi^2 \tanh 2z\right). \tag{XXI.113}$$

que muestra que la distribución en equilibrio de osciladores armónicos es gaussiana alrededor del origen con anchura dependiente de la temperatura.

XXI.15 Demuestre que en el límite $kT \to 0$, la ecuación (T21.67) (*i.e.*, (XXI.112)) contiene sólo al estado base, mientras que en el límite $kT \to \infty$, la densidad dada por la ecuación (T21.68) (*i.e.*, (XXI.113)) tiende a la distribución clásica $\sim e^{-\beta E}$.

El límite de bajas temperaturas corresponde a z grande; en este límite la ecuación (XXI.112) se reduce a

$$\rho\left(\xi,\xi'\right)\rightarrow\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{1}{2}\hbar\omega\beta\right)\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)\exp\left(-\frac{m\omega x'^2}{2\hbar}\right), \quad \text{(XXI.114)}$$

expresión puede reescribirse como (usando un signo de igualdad)

$$\rho\left(\xi,\xi'\right)=e^{-\beta E_0}\varphi_0\left(x\right)\varphi_0^*\left(x'\right), \quad \text{(XXI.115)}$$

con

$$\varphi_0\left(x\right)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

la función de onda para el estado base del oscilador armónico y E_0 la correspondiente energía propia. Así pues, para $kT\rightarrow 0$ sólo el estado base produce una contribución efectiva.

En el límite de altas temperaturas $z\rightarrow 0$, la ecuación (XXI.113) toma la forma

$$\rho_B=\frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_0^2 2z}}\exp\left(-\xi^2 z\right). \quad \text{(XXI.116)}$$

Sustituyendo $z=\hbar\omega/2kT$, se tiene

$$\rho_B=\sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2\omega^2}}\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2kT}\xi^2\right), \quad \text{(XXI.117)}$$

o bien

$$\rho_B=\sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2\omega^2}}\exp\left(-\frac{m\omega^2}{2kT}x^2\right)=\sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2\omega^2}}\exp\left[-\beta V(x)\right], \quad \text{(XXI.118)}$$

expresión que, una vez normalizada, corresponde al factor espacial de la distribución canónica clásica.

XXI.16 Resuelva la ecuación diferencial (T21.66) para el caso de partícula libre y muestre que la solución fundamental (es decir, la que se reduce a una delta de Dirac para $z\rightarrow 0$) es

$$\rho(x,x';\beta)=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}}e^{-m(x-x')^2/2\hbar^2\beta}.$$

La ecuación diferencial a resolver es la ecuación de Bloch (XXI.98) para el caso de partícula libre. Esta ecuación determina la dependencia en la temperatura de la matriz de densidad *no*normalizada definida en la ecuación (XXI.95), como se verifica derivando esta última respecto de β. Introduciendo el hamiltoniano de partícula libre unidimensional se obtiene la forma explícita de la ecuación a resolver:

$$\frac{\partial\rho_B}{\partial\beta}=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\rho_B}{\partial x^2}. \quad \text{(XXI.119)}$$

Esta ecuación se resuelve fácilmente pasando al espacio de Fourier con la transformación

$$\rho_B(x,\beta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\tilde{\rho}_B(k,\beta)e^{ikx}\,dk. \quad \text{(XXI.120)}$$

Efectuando dos derivaciones sucesivas se obtiene

$$\frac{\partial^2 \rho_B}{\partial x^2} = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int k^2 \tilde{\rho}_B\,(k,\beta)\, e^{ikx}\, dk, \tag{XXI.121}$$

y la transformada de la ecuación (XXI.119) resulta

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_B}{\partial \beta} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\rho}_B\,. \tag{XXI.122}$$

La solución de (XXI.122) es

$$\tilde{\rho}_B(k,\beta) = \tilde{\rho}_{0B} e^{-\hbar^2 k^2 \beta/2m}, \tag{XXI.123}$$

con $\tilde{\rho}_{0B}$ la constante de integración. Sustituyendo este resultado en (XXI.120) se obtiene

$$\rho_B(x,\beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \tilde{\rho}_{0B} e^{+ikx - \hbar^2 k^2 \beta/2m}\, dk. \tag{XXI.124}$$

Como se busca una solución que se reduzca a una delta de Dirac cuando $\beta \to 0$, debe cumplirse que

$$\tilde{\rho}_{0B} \equiv \tilde{\rho}_B(\beta = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \rho\,(x,0)\, e^{-ikx}\, dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \delta\,(x - x_0)\, e^{-ikx}\, dk, \tag{XXI.125}$$

o sea

$$\tilde{\rho}_{0B} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0}. \tag{XXI.126}$$

Sustituyendo en (XXI.124),

$$\rho_B(x,\beta) = \frac{1}{2\pi} \int e^{+ik(x-x_0) - \hbar^2 k^2 \beta/2m}\, dk. \tag{XXI.127}$$

Realizando la integral se llega al resultado solicitado (con la sustitución $x_0 \to x'$):

$$\rho_B\left(x, x'; \beta\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} e^{-m(x-x')^2/2\hbar^2\beta}. \tag{XXI.128}$$

Esta densidad corresponde a una distribución espacial uniforme de partículas,

$$\rho\,(x;\beta) \;= \rho_B\,(x,x;\beta) = \sqrt{m/2\pi\hbar^2\beta}. \tag{XXI.129}$$

XXI.17 Muestre que la matriz de densidad de partícula libre en la representación de momentos es

$$\rho(p,p') = \delta(p - p') e^{-\beta p^2/2m}.$$

En el capítulo 10 del texto se muestra que para pasar de la representación de coordenadas a la de momentos debe realizarse una transformación de Fourier. En particular, para los elementos de matriz de un operador $\hat{F}$ se obtiene la ley de transformación

$$\langle p|\, \hat{F}\, \left|p'\right\rangle = F(p,p') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx'\, e^{i(px - p'x')/\hbar} F\left(x', x\right). \tag{XXI.130}$$

Insertando en esta expresión la matriz de densidad para la partícula libre determinada en el problema anterior, ecuación (XXI.128), se obtiene

$$\begin{aligned}\rho(p,p';\beta) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,e^{i(px-p'x')/\hbar}e^{-m(x-x')^2/2\hbar^2\beta}\\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}}\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,\exp\left(-\frac{mx'^2}{2\hbar^2\beta}-\frac{ip'x'}{\hbar}\right)\\ &\quad\times\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\exp\left(\frac{ip}{\hbar}x+\frac{mx'}{\hbar^2\beta}x-\frac{m}{2\hbar^2\beta}x^2\right).\end{aligned}\tag{XXI.131}$$

Como

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\exp\left[-\frac{mx^2}{2\hbar^2\beta}+\left(\frac{mx'}{\hbar^2\beta}+\frac{ip}{\hbar}\right)x\right]=\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{m}}\exp\left[\frac{\hbar^2\beta}{2m}\left(\frac{mx'}{\hbar^2\beta}+\frac{ip}{\hbar}\right)^2\right],$$

se obtiene para la matriz de densidad de partícula libre en el espacio de momentos

$$\rho(p,p';\beta)=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{-\beta p^2/2m}\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,e^{i(p-p')x/\hbar}=\delta\left(p-p'\right)e^{-\beta p^2/2m}.\tag{XXI.132}$$

XXI.18 Rederive la solución obtenida en el problema anterior a partir de la expresión para el propagador de partícula libre, ecuación (T4.45), mediante el cambio de variable $t\rightarrow$ const $\times\,\beta$.

La ecuación diferencial para la matriz de densidad no normalizada de partícula libre es (XXI.119),

$$\frac{\partial\rho_B(\beta)}{\partial\beta}=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\rho_B(\beta)}{\partial x^2}.\tag{XXI.133}$$

A su vez, la ecuación que determina el propagador de partícula libre es la correspondiente ecuación de Schrödinger,

$$-i\hbar\frac{\partial K(t)}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2K(t)}{\partial x^2}.\tag{XXI.134}$$

Comparando, queda claro que ambas ecuaciones coinciden si se hace la correspondencia

$$t\leftrightarrow -i\hbar\beta,\tag{XXI.135}$$

es decir, si se establece una correspondencia formal entre la temperatura y tiempos imaginarios. Con esta transformación deberá cumplirse que $K(t)\rightarrow K(-i\hbar\beta)=\rho_B(\beta)$. Vamos a utilizar esta observación para derivar la matriz de densidad de la partícula libre a partir del propagador de partícula libre.

El propagador de partícula libre (retardado, para $t>t_0$) se construye en la sección 4.5 del texto, y es

$$K(x,t\mid x_0,t_0)=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\,(t-t_0)}}\exp\left[\frac{im\,(x-x_0)^2}{2\hbar\,(t-t_0)}\right].\tag{XXI.136}$$

Podemos tomar $t_0=0$ sin pérdida de generalidad (t es el tiempo transcurrido en (XXI.135)),

$$K(x,t\mid x_0,0)=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar it}}\exp\left[\frac{im\,(x-x_0)^2}{2\hbar t}\right].\tag{XXI.137}$$

Con el cambio de variable (XXI.135) y poniendo $x_0 = x'$, esta expresión se transforma en

$$K(x,x';\beta) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}}\exp\left[-\frac{m\,(x-x')^2}{2\hbar^2\beta}\right], \tag{XXI.138}$$

lo que coincide con la matriz de densidad $\rho_B(x,x';\beta)$ para partícula libre, ecuación (XXI.128), como era de esperarse a partir de la discusión anterior.

La coincidencia de resultados es producto de la similitud de las ecuaciones diferenciales que determinan las correspondientes funciones. De esta coincidencia no se debe concluir que la temperatura es "equivalente" en algún sentido físico (superficial o profundo) a un tiempo imaginario, o viceversa. Se trata de una analogía formal, útil para obtener resultados y establecer correspondencias matemáticas, pero resulta artificioso dotarla de significación física especial.

XXI.19 Muestre que siempre se cumple que

$$\left\langle \overset{\wedge}{\dot{\rho}} \right\rangle = 0.$$

La ecuación de evolución del operador de densidad es la ecuación (T21.34),

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = -\left[\hat{\rho},\hat{H}\right]. \tag{XXI.139}$$

De aquí sigue de inmediato que

$$\begin{aligned}\left\langle \overset{\wedge}{\dot{\rho}} \right\rangle &= \operatorname{tr}\hat{\rho}\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\operatorname{tr}\hat{\rho}\left[\hat{\rho},\hat{H}\right] \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\operatorname{tr}\left(\hat{\rho}^2\hat{H}-\hat{\rho}\hat{H}\hat{\rho}\right) = -\frac{1}{i\hbar}\operatorname{tr}\left(\hat{\rho}\hat{H}\hat{\rho}-\hat{\rho}\hat{H}\hat{\rho}\right) = 0. \end{aligned}\tag{XXI.140}$$

Para obtener la penúltima expresión se utilizó la propiedad de las trazas estudiada en el problema XXI.1, es decir, se realizó un reordenamiento cíclico de los factores en el cálculo de la traza. El resultado anterior es general, y vale aún para hamiltonianos que dependen del tiempo.

XXI.20 Compruebe que la ecuación (T21.34) se escribe en la representación de coordenadas en la forma de la ecuación (4) del problema ilustrativo 21.4 del texto.

La ecuación (T21.34),

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} = \left[\hat{H},\hat{\rho}\right], \tag{XXI.141}$$

es la *ecuación de von Neumann*que determina la evolución temporal de la matriz de densidad. Se trata de demostrar que en la representación de coordenadas esta ecuación fundamental toma la forma

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\left(x,x'\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{\partial^2}{\partial x'^2}\right]\rho\left(x,x'\right)+\left[V\left(x\right)-V\left(x'\right)\right]\rho\left(x,x'\right). \tag{XXI.142}$$

Tomando los elementos de matriz de la ecuación (XXI.141) para pasar a la representación de coordenadas, se obtiene

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\langle x\mid\hat{\rho}\mid x'\right\rangle = \left\langle x\mid\hat{H}\hat{\rho}\mid x'\right\rangle - \left\langle x\mid\hat{\rho}\hat{H}\mid x'\right\rangle. \tag{XXI.143}$$

La inserción de un desarrollo de la unidad permite escribir la expresión anterior en términos de elementos de matriz; por ejemplo,

$$\begin{aligned}\left\langle x \mid \hat{H}\hat{\rho} \mid x' \right\rangle &= \int dx'' \left\langle x \mid \hat{H} \mid x'' \right\rangle \left\langle x'' \mid \hat{\rho} \mid x' \right\rangle \\ &= \int dx'' \left[\frac{1}{2m}\left\langle x \mid \hat{p}^2 \mid x'' \right\rangle + \left\langle x \mid V(x) \mid x'' \right\rangle\right] \left\langle x'' \mid \hat{\rho} \mid x' \right\rangle \qquad \text{(XXI.144)} \\ &= \int dx'' \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x''^2}\delta(x-x'') + V(x'')\delta(x-x'')\right] \left\langle x'' \mid \hat{\rho} \mid x' \right\rangle . \qquad \text{(XXI.145)}\end{aligned}$$

Integrando dos veces por partes la primera integral y realizando la segunda, la expresión anterior se reduce a

$$\left\langle x \mid \hat{H}\hat{\rho} \mid x' \right\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right] \left\langle x \mid \hat{\rho} \mid x' \right\rangle . \qquad \text{(XXI.146)}$$

Procediendo de forma análoga con el segundo término, se obtiene

$$\left\langle x \mid \hat{\rho}\hat{H} \mid x' \right\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + V(x')\right] \left\langle x \mid \hat{\rho} \mid x' \right\rangle . \qquad \text{(XXI.147)}$$

Sustituyendo estas dos últimas expresiones en (XXI.143), e introduciendo la notación $\langle x \mid \hat{\rho} \mid x' \rangle \equiv \rho(x, x')$, se obtiene la ecuación (XXI.142), que corresponde a la ecuación (4) del problema ilustrativo 21.4 del texto.

Para un estado puro con matriz de densidad $\rho(x, x') = \psi(x)\psi^*(x')$, la aplicación por separado de la ecuación de Schrödinger a cada una de las dos funciones de onda conduce de manera inmediata a la ecuación (XXI.142).

XXI.21 Considere un sistema complejo compuesto por N electrones, como puede ser, por ejemplo, una molécula; el sistema se encuentra en el estado puro $\psi = \psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)$, que corresponde a la matriz de densidad $\hat{\rho}_N(x_1, \ldots, x_N; x'_1, \ldots, x'_N) = \psi(\{x_i\})\,\psi^*(\{x'_i\})$. Un electrón dado de este sistema puede ser visto como un subsistema descrito por una matriz de densidad reducida de una partícula; en concreto, si el electrón en cuestión es el que corresponde a la coordenada x_1, esta matriz de densidad reducida es

$$\hat{\rho}'_1(x_1; x'_1) = \int \psi^*(x_1, x_2, \ldots, x_N)\,\psi(x'_1, x_2, \ldots, x_N)\,dx_2 \cdots dx_N .$$

Demuestre que $\hat{\rho}'_1$ es idempotente sólo si ψ se reduce a un producto de orbitales independientes. *Comentario*: Este resultado muestra que cuando la función de onda no es un simple producto de orbitales (o sea, en un lenguaje más frecuente, cuando no es *separable*), el estado de un electrón dado del sistema no es puro, pese a que el sistema total se encuentra en un estado puro. Sin embargo, las mezclas que resultan de la reducción no pueden ser del mismo tipo que las introducidas en la mecánica cuántica estadística, ya que un sistema compuesto de subsistemas que no están en estados puros no puede estar en un estado puro, como se postuló inicialmente. Ésta es la razón por la que las mezclas descritas por matrices de densidad reducidas como $\hat{\rho}'_1(x_1; x'_1)$, $\hat{\rho}'_2(x_1, x_2; x'_1, x'_2)$, etc., han sido llamadas por B. d'Espagnat

(1965)[5] *mezclas impropias*, para distinguirlas de las *mezclas propias*, como las usadas en la mecánica cuántica estadística (también se les conoce como *mezclas de primera*(propias) y *segunda*(impropias) *clase*). Nótese que el origen de este fenómeno es la existencia de correlaciones entre los diferentes subsistemas que componen el sistema en el caso impropio, correlaciones inexistentes en una mezcla propia.

Con objeto de que la idea quede clara, vamos a restringirnos al caso más simple posible; la generalización a situaciones más complejas no ofrece dificultad de principio. Consideremos un sistema compuesto por sólo dos subsistemas 1 y 2, que se encuentran en los estados ortonormales 1, 2, respectivamente. Supongamos primero que el estado es factorizable, de tal manera que la función de onda y la correspondiente matriz de densidad las podemos escribir en la forma

$$\psi(x_1, x_2) = \varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2), \tag{XXI.148}$$

$$\rho(x_1, x_2; x_1', x_2') = \varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2)\varphi_1^*(x_1')\varphi_2^*(x_2'). \tag{XXI.149}$$

La matriz de densidad reducida del subsistema 1 es

$$\begin{aligned} \rho'(x_1; x_1') &= \mathrm{tr}_2\rho(x_1, x_1') = \int \rho(x_1, x_2; x_1', x_2)dx_2 \\ &= \varphi_1(x_1)\varphi_1^*(x_1') \int dx_2\varphi_2(x_2)\varphi_2^*(x_2) \\ &= \varphi_1(x_1)\varphi_1^*(x_1') = \rho_1(x_1; x_1'). \end{aligned} \tag{XXI.150}$$

Ésta es la matriz de densidad que corresponde al estado puro $\varphi_1(x_1)$. Luego encontramos que la matriz de densidad reducida obtenida a partir de una matriz de densidad para estados separables (factorizables), es pura.

Consideremos ahora un típico ejemplo de estado puro no separable, dado por la función de onda simétrica

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) + \varphi_2(x_1)\varphi_1(x_2)\right]. \tag{XXI.151}$$

La correspondiente matriz de densidad es

$$\begin{aligned} \rho(x_1, x_2; x_1', x_2') &= \frac{1}{2} \left[\varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) + \varphi_2(x_1)\varphi_1(x_2)\right] \\ &\quad \times \left[\varphi_1^*(x_1')\varphi_2^*(x_2') + \varphi_2^*(x_1')\varphi_1^*(x_2')\right]. \end{aligned} \tag{XXI.152}$$

La matriz de densidad reducida del subsistema 1 es

$$\begin{aligned} \rho'(x_1, x_1') &= \frac{1}{2} \int dx_2 \rho(x_1, x_2; x_1', x_2') \\ &= \frac{1}{2} \int dx_2 \left[\varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) + \varphi_2(x_1)\varphi_1(x_2)\right] \\ &\quad \times \left[\varphi_1^*(x_1')\varphi_2^*(x_2) + \varphi_2^*(x_1')\varphi_1^*(x_2)\right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\varphi_1(x_1)\varphi_1^*(x_1') + \varphi_2(x_1)\varphi_2^*(x_1')\right]. \end{aligned} \tag{XXI.153}$$

Esta matriz de densidad describe una mezcla de los estados ortonormales 1, 2, ambos con el mismo peso. Luego la matriz de densidad reducida, obtenida a

[5] Puede verse, por ejemplo, B. d'Espagnat, *Conceptual Foundations of Quantum Mechanics*(Addison-Wesley, Nueva York, 1976).

partir de una matriz de densidad que describe un estado puro no separable (no factorizable), corresponde a un estado no puro. En el problema XXI.27 se estudian algunos aspectos relativos a este mismo tema desde una perspectiva más amplia.

XXI.22 Desarrolle a primer orden la teoría de perturbaciones de la matriz de densidad que describe un sistema en equilibrio a temperatura T.[6] *Sugerencia*: Haga primero el cálculo para $\hat{\rho}$ no normalizada (ecuación (T21.62)) y después para $\hat{\rho}$ normalizada (ecuación (T21.48)). Los resultados son:

$$\hat{\rho}^{(1)}_{\mathsf{nonorm}} = \hat{\rho}^{(0)}_{\mathsf{nonorm}} - \int_0^\beta \hat{\rho}^{(0)}_{\mathsf{nonorm}}(\beta-\beta')\hat{H}_{\mathsf{pert}}\hat{\rho}^{(0)}_{\mathsf{nonorm}}(\beta')\,d\beta',$$

$$Z^{(1)} = \mathsf{tr}\,\hat{\rho}^{(1)},$$

$$\hat{\rho}^{(1)}_{\mathsf{norm}} = \frac{\hat{\rho}^{(1)}_{\mathsf{nonorm}}}{Z^{(0)}} - \frac{\hat{\rho}^{(1)}_{\mathsf{nonorm}}}{Z^{(0)}}\frac{Z^{(1)}}{Z^{(0)}},$$

$$E^{(1)} = \mathsf{tr}\left(\hat{H}_0\hat{\rho}^{(1)}_{\mathsf{norm}} + \hat{H}_{\mathsf{pert}}\hat{\rho}^{(0)}_{\mathsf{norm}}\right).$$

La ecuación de evolución de la matriz de densidad no normalizada es la *ecuación de Bloch*(T21.63)

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}} = -\hat{H}\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}}. \tag{XXI.154}$$

El hamiltoniano es $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\mathrm{pert}}$, donde $H_{\mathrm{pert}} \equiv H'$ es una perturbación pequeña; la ecuación no perturbada es

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\hat{\rho}^{(0)}_{\mathrm{nonorm}} = -\hat{H}_0\hat{\rho}^{(0)}_{\mathrm{nonorm}}. \tag{XXI.155}$$

Como los efectos de la perturbación son pequeños, $\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}}$ deberá estar próxima a $\hat{\rho}^{(0)}_{\mathrm{nonorm}} = e^{-\beta\hat{H}_0}$, lo que significa que $e^{\beta\hat{H}_0}\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}}$ debe depender poco de β. Con ayuda de (XXI.154) se obtiene

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\beta}e^{\beta\hat{H}_0}\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}} &= \hat{H}_0e^{\beta\hat{H}_0}\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}} + e^{\beta\hat{H}_0}\frac{\partial}{\partial\beta}\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}}\\ &= e^{\beta\hat{H}_0}\hat{H}_0\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}} - e^{\beta\hat{H}_0}\hat{H}\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}} = -e^{\beta\hat{H}_0}H'\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}},\end{aligned} \tag{XXI.156}$$

que muestra que efectivamente $e^{\beta\hat{H}_0}\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}}$ varía lentamente con β si la perturbación es pequeña. Integrando (XXI.156) respecto de β se encuentra

$$e^{\beta\hat{H}_0}\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}}\Big|_0^\beta = e^{\beta\hat{H}_0}\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}} - 1 = -\int_0^\beta e^{\beta'\hat{H}_0}H'\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}}(\beta')d\beta'. \tag{XXI.157}$$

Para escribir (XXI.157) tomamos en cuenta que para $\beta = 0$,

$$e^{\beta\hat{H}_0}\hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}}(\beta) = \hat{\rho}_{\mathrm{nonorm}}(0) = 1. \tag{XXI.158}$$

[6] R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **76**(1949) 749; véase también P. Smet y J. Tillieu, *Physique et Radium* **23** (1962) 939.

De (XXI.157) sigue que

$$\hat{\rho}_{\rm nonorm} = e^{-\beta\hat{H}_0} - \int_0^\beta e^{-(\beta-\beta')\hat{H}_0} H' \hat{\rho}_{\rm nonorm}(\beta') d\beta',$$

o sea

$$\hat{\rho}_{\rm nonorm}(\beta) = \hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(\beta) - \int_0^\beta \hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(\beta-\beta') H' \hat{\rho}_{\rm nonorm}(\beta') d\beta'. \qquad \text{(XXI.159)}$$

Hasta aquí no se ha hecho ninguna aproximación, por lo que la ecuación (XXI.159) es apropiada para obtener las correcciones a $\hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(\beta)$ por iteración. Se obtiene, escribiendo el resultado explícitamente hasta segundo orden,

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{\rm nonorm}(\beta) = \hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(\beta) &- \int_0^\beta d\beta' \hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(\beta-\beta') H' \hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(\beta') \\ &+ \int_0^\beta d\beta' \int_0^{\beta'} d\beta'' \hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(\beta-\beta') H' \hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(\beta'-\beta'') H' \hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(\beta'') - \cdots\end{aligned} \qquad \text{(XXI.160)}$$

Cuando la perturbación se debe a un potencial dependiente de la posición $H' = V(x)$, en la representación de coordenadas se puede escribir

$$\left\langle x' \right| H' \hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(\beta) \left| x \right\rangle = V(x') \rho^{(0)}_{\rm nonorm}(x', x; \beta) \qquad \text{(XXI.161)}$$

y de (XXI.160) se obtiene a primer orden

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{\rm nonorm}(x, x'; \beta) &= \hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(x, x'; \beta) \\ &\quad - \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_0^\beta d\beta' \hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(x, y; \beta-\beta') V(y) \hat{\rho}^{(0)}_{\rm nonorm}(y, x'; \beta').\end{aligned} \qquad \text{(XXI.162)}$$

Analizaremos ahora el problema de la normalización, considerando sólo correcciones hasta primer orden. De

$$\rho_{\rm nonorm} = \rho^{(0)}_{\rm nonorm} + \rho^{(1)}_{\rm nonorm} \qquad \text{(XXI.163)}$$

sigue

$$\mathrm{tr}\rho_{\rm nonorm} \equiv Z = \mathrm{tr}\rho^{(0)}_{\rm nonorm} + \mathrm{tr}\rho^{(1)}_{\rm nonorm} \equiv Z^{(0)} + Z^{(1)}, \qquad \text{(XXI.164)}$$

y la matriz de densidad normalizada resulta, siempre a primer orden,

$$\begin{aligned}\rho_{\rm norm} &= \frac{\rho^{(0)}_{\rm nonorm} + \rho^{(1)}_{\rm nonorm}}{Z^{(0)} + Z^{(1)}} = \frac{1}{Z^{(0)}} \left(1 - \frac{Z^{(1)}}{Z^{(0)}}\right) \left(\rho^{(0)}_{\rm nonorm} + \rho^{(1)}_{\rm nonorm}\right) \\ &= \frac{\rho^{(0)}_{\rm nonorm}}{Z^{(0)}} + \frac{\rho^{(1)}_{\rm nonorm}}{Z^{(0)}} - \frac{Z^{(1)}}{Z^{(0)}} \frac{\rho^{(0)}_{\rm nonorm}}{Z^{(0)}},\end{aligned} \qquad \text{(XXI.165)}$$

que es otro de los resultados solicitados.

Finalmente, el valor esperado de la energía se escribe, hasta primer orden inclusive, como

$$\begin{aligned} E &= \left\langle \hat{H} \right\rangle = \mathrm{tr}\left(\rho_{\mathrm{norm}}\hat{H}\right) \\ &= \mathrm{tr}\left[\left(\rho^{(0)}_{\mathrm{norm}} + \rho^{(1)}_{\mathrm{norm}}\right)\left(\hat{H}_0 + \hat{H}'\right)\right] = \mathrm{tr}\left(\rho^{(0)}_{\mathrm{norm}}\hat{H}_0 + \rho^{(1)}_{\mathrm{norm}}\hat{H}_0 + \rho^{(0)}_{\mathrm{norm}}\hat{H}'\right) \\ &= \mathrm{tr}\left(\rho^{(0)}_{\mathrm{norm}}\hat{H}_0\right) + \mathrm{tr}\left(\rho^{(1)}_{\mathrm{norm}}\hat{H}_0 + \rho^{(0)}_{\mathrm{norm}}\hat{H}'\right) \\ &= E^{(0)} + E^{(1)} + \cdots, \end{aligned} \tag{XXI.166}$$

por lo que la corrección a primer orden es

$$E^{(1)} = \mathrm{tr}\left(\rho^{(1)}_{\mathrm{norm}}\hat{H}_0 + \rho^{(0)}_{\mathrm{norm}}\hat{H}_{\mathrm{pert}}\right).$$

Este resultado muestra que la corrección a la energía a primer orden tiene dos orígenes: un primer término es el valor esperado del hamiltoniano de perturbación, tomado sobre la mezcla original, $\delta E^{(1)\prime} = \mathrm{tr}\left(\rho^{(0)}_{\mathrm{norm}}\hat{H}_{\mathrm{pert}}\right) = \left\langle \hat{H}' \right\rangle_0$; a esta corrección debe agregarse el efecto medio sobre $\hat{H}_0$ debido a la modificación de la propia mezcla generada por la perturbación, $\delta E^{(1)\prime\prime} = \mathrm{tr}\left(\rho^{(1)}_{\mathrm{norm}}\hat{H}_0\right) = \mathrm{tr}\left(\delta\rho_{\mathrm{norm}}\hat{H}_0\right)$. El primer término es usual en la teoría de perturbaciones de la ecuación de Schrödinger, pero el segundo parece extraño a primera vista. Es fácil entender su origen considerando la forma de la matriz de densidad de un estado puro corregida a primer orden, o sea,

$$\begin{aligned} \rho(x,x') &= (\psi^{(0)}(x) + \psi^{(1)}(x))(\psi^{(0)*}(x') + \psi^{(1)*}(x')) \\ &= \rho^{(0)}(x,x') + \psi^{(0)}(x)\psi^{(1)*}(x') + \psi^{(1)}(x)\psi^{(0)*}(x'). \end{aligned}$$

Al tomar la traza $\mathrm{tr}\hat{\rho}\hat{A}$ para calcular el valor esperado de $\hat{A}$, aparece la contribución de primer orden

$$\delta^{(1)\prime\prime}A = \int\int \left[\psi^{(0)}(x)\psi^{(1)*}(x') + \psi^{(1)}(x)\psi^{(0)*}(x')\right] A(x,x')dxdx'.$$

Como complemento al ejercicio se obtiene a continuación el desarrollo perturbativo de la matriz de densidad utilizando la descripción de interacción (estudiada en el problema XVII.25). Si $\mathcal{H}$ representa el hamiltoniano de interacción, la ecuación de evolución de la matriz de densidad en la descripción de interacción es

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\left[\mathcal{H}(t), \hat{\rho}(t)\right],$$

en donde

$$\mathcal{H}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\mathcal{H}e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

y $\hat{H}_0$ representa el hamiltoniano no perturbado. Integrando formalmente se obtiene

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}(0) - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \left[\mathcal{H}(t'), \hat{\rho}(t')\right]. \tag{XXI.167}$$

Iterando este resultado se obtiene de manera sucesiva

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(t) &= \hat{\rho}(0) - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \left[\mathcal{H}(t'), \hat{\rho}(0)\right] \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \left[\mathcal{H}(t'), \left[\mathcal{H}(t''), \hat{\rho}(0)\right]\right] + \ldots, \quad \text{(XXI.168)}\end{aligned}$$

que es el desarrollo buscado. Por ejemplo, la población de un cierto estado $|k\rangle$ en el tiempo t hasta segundo orden es

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{kk}(t) &= \hat{\rho}_{kk}(0) - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \langle k| \left[\mathcal{H}(t'), \hat{\rho}(0)\right] |k\rangle \\ &-\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \langle k| \left[\mathcal{H}(t'), \left[\mathcal{H}(t''), \hat{\rho}(0)\right]\right] |k\rangle .\end{aligned}$$

XXI.23 Demuestre que si $\hat{P}_k$ es el operador de proyección sobre el estado k de una mezcla, entonces $\left\langle \hat{P}_k \right\rangle = w_k$. Compare con el problema (X.8).

En su propia representación, la matriz de densidad que describe la mezcla en cuestión tiene la forma

$$\hat{\rho} = \sum_j w_j |j\rangle \langle j| . \quad \text{(XXI.169)}$$

De aquí sigue

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{P}_k \right\rangle &= \mathrm{tr}\hat{\rho}\hat{P}_k = \mathrm{tr}\sum_j w_j |j\rangle \langle j|\, k\rangle \langle k| \\ &= \mathrm{tr}\sum_j w_j |j\rangle \langle k|\, \delta_{jk} = \mathrm{tr} w_k |k\rangle \langle k| = w_k \mathrm{tr} \langle k|\, k\rangle = w_k. \quad \text{(XXI.170)}\end{aligned}$$

Este resultado muestra que, en general, podemos escribir los pesos que aparecen en una matriz de densidad en la forma

$$w_k = \mathrm{tr}\hat{\rho}\hat{P}_k = \left\langle \hat{P}_k \right\rangle . \quad \text{(XXI.171)}$$

XXI.2. Problemas adicionales

XXI.24 Demuestre que un estado puro gobernado por la ecuación de Schrödinger no puede evolucionar hacia una mezcla.

Por tratarse de un estado puro inicial (es decir, en el tiempo t_0) se cumple que

$$\hat{\rho}^2(t_0) = \hat{\rho}(t_0). \quad \text{(XXI.172)}$$

Como por hipótesis la ecuación de Schrödinger determina la evolución del sistema, podemos escribir

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^\dagger(t, t_0), \quad \text{(XXI.173)}$$

donde $\hat{U}(t, t_0)$ es el operador (unitario) de evolución temporal. De aquí sigue que

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^2(t) &= \hat{U}(t, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^\dagger(t, t_0) \\ &= \hat{U}(t, t_0)\hat{\rho}^2(t_0)\hat{U}^\dagger(t, t_0) \\ &= \hat{U}(t, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^\dagger(t, t_0) = \hat{\rho}(t), \quad \text{(XXI.174)}\end{aligned}$$

o sea,

$$\hat{\rho}^2(t) = \hat{\rho}(t) \tag{XXI.175}$$

y la matriz $\hat{\rho}(t)$ continúa describiendo un estado puro para todo t. Luego la naturaleza de mezcla o estado puro de un sistema se conserva durante la evolución causal determinada por la ecuación de Schrödinger.

Este resultado es muy importante para el análisis de ciertos problemas fundamentales, particularmente los relacionados con el *colapso (o reducción) de la función de onda*. Considérese un estado puro descrito por la función de onda

$$\psi(x) = \sum_n a_n \varphi_n(x). \tag{XXI.176}$$

La correspondiente matriz de densidad (también en la representación de coordenadas) es

$$\begin{aligned} \rho(x,x') &= \sum_{n,n'} a_n a^*_{n'} \varphi_n(x) \varphi^*_{n'}(x') \\ &= \sum_n |a_n|^2 \varphi_n(x) \varphi^*_n(x') + \sum_{n \neq n'} a_n a^*_{n'} \varphi_n(x) \varphi^*_{n'}(x') \\ &= \sum_n |a_n|^2 \rho_n(x,x') + \sum_{n \neq n'} a_n a^*_{n'} \varphi_n(x) \varphi^*_{n'}(x'). \end{aligned} \tag{XXI.177}$$

Al escribir la última igualdad se ha identificado la matriz de densidad de cada uno de los estados n, $\rho_n(x,x') = \varphi_n(x)\varphi^*_n(x')$. Los términos que constituyen la segunda suma describen la interferencia entre los estados, característica de las superposiciones coherentes que constituyen los estados puros como (XXI.176).

Consideremos por otro lado una mezcla descrita por la matriz de densidad con pesos $w_n = |a_n|^2$,

$$\rho(x,x') = \sum_n |a_n|^2 \rho_n(x,x'). \tag{XXI.178}$$

Esta mezcla se obtiene del estado puro anterior (XXI.177) mediante la supresión de los términos de interferencia. La transición del estado puro descrito por la función de onda (XXI.176) —equivalentemente, por la matriz de densidad (XXI.177)— a la mezcla descrita por la matriz de densidad (XXI.178) es lo que constituye el colapso de la función de onda: se trata de un 'proceso' en que se pierde la coherencia inicial entre los estados componentes, para dar lugar a la superposición incoherente característica de las mezclas. El resultado anterior nos permite afirmar que la evolución unitaria característica de los sistemas cuánticos dejados a sí mismos no puede conducir al colapso (a la *decoherencia*) de la función de onda, o sea, ninguna evolución causal de un sistema controlado por la ecuación de Schrödinger (o la de von Neumann) puede conducir de un estado del tipo (XXI.177) a uno del tipo (XXI.178) o viceversa.

En las teorías de la medición que frecuentemente se adoptan dentro de los esquemas usuales de la mecánica cuántica (como *agregados*a ella, pero que no forman parte de la misma en su versión convencional) se describe la acción de los instrumentos o procedimientos de medición de tal manera que da lugar a una transición del tipo (XXI.177)→(XXI.178), es decir, se postula que la medición de un observable (del que las φ_n son funciones propias) rompe la coherencia original entre las amplitudes componentes. Es claro que esta "evolución" no sigue las

reglas usuales de la teoría cuántica y requiere de la introducción de procesos no unitarios que se identifican, precisamente, con los procesos de medición. Desde esta perspectiva, teorías de tal tipo no pertenecen propiamente a la mecánica cuántica.

XXI.25 Considere un estado puro descrito por el vector de estado

$$|\Psi\rangle = a(t)\,|u\rangle + b(t)e^{i\beta}\,|v\rangle\,.$$

Suponga que este sistema se encuentra en un medio aleatorio, cuya acción se refleja únicamente en que la fase β adquiere en cada caso un valor al azar, distribuido uniformemente en $[0, 2\pi]$. Demuestre que al promediar sobre esta fase, el estado puro se transforma en una mezcla.

La matriz de densidad del sistema es

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= |\Psi\rangle\langle\Psi| \\ &= |a(t)|^2\,|u\rangle\langle u| + |b(t)|^2\,|v\rangle\langle v| + a(t)b^*(t)e^{-i\beta}\,|u\rangle\langle v| + a^*(t)b(t)e^{i\beta}\,|v\rangle\langle u|\,.\end{aligned} \tag{XXI.179}$$

Esta matriz de densidad sigue describiendo un estado puro, naturalmente, como lo atestigua la presencia de los términos de interferencia. Pero lo que nos interesa no es $\hat{\rho}$, sino su promedio sobre la fase β, esto es,

$$\bar{\rho} \equiv \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} |\Psi\rangle\langle\Psi|\,d\beta, \tag{XXI.180}$$

o sea,

$$\bar{\rho} = |a(t)|^2\,|u\rangle\langle u| + |b(t)|^2\,|v\rangle\langle v|\,. \tag{XXI.181}$$

Esta densidad corresponde a una mezcla.[7]El resultado muestra que el proceso de promediar sobre las fluctuaciones aleatorias de la fase, descrito por la ecuación (XXI.180), no es consistente con la dinámica de Schrödinger. Procesos que en alguna forma son similares a los que se acaban de describir (aunque considerablemente menos ingenuos) se han considerado en la literatura reciente (bajo nombres como *decoherencia natural*, *decoherencia espontánea*, etc.) para explicar el límite clásico de la mecánica cuántica. El punto está en que, dejados a sí mismos, los estados puros de sistemas compuestos no pueden evolucionar hacia los estados macroscópicos observados, que son característicamente descritos por mezclas incoherentes, de tal manera que se hace necesario introducir mecanismos que rompan la coherencia. Estos mecanismos son atribuidos por algunos autores a la acción del "ambiente" sobre el sistema; sin embargo, se trata de un tema aún abierto, del que falta mucho por comprender.

XXI.26 En general se cumple que la matriz de densidad satisface la condición (T21.22),

$$\mathrm{tr}\,\hat{\rho}^2 \leq 1.$$

Demuestre que el signo igual se aplica si y sólo si el estado es puro.

[7]Éste es un ejemplo concreto del resultado general obtenido en el problema XXI.3.

Que la condición es suficiente es inmediato de la propiedad $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ característica de los estados puros, cuya traza es la unidad. Para mostrar su necesidad, procedemos como sigue: Escribimos la matriz de densidad en la forma general

$$\hat{\rho} = \sum w_k \left|k\right\rangle \left\langle k\right|, \tag{XXI.182}$$

donde los kets $|k\rangle$ no son necesariamente ortogonales (aunque sí están normalizados). Denotando con $|\alpha\rangle$ la base (ortonormal) sobre la que se toma la traza, podemos escribir la condición $\mathrm{tr}\hat{\rho}^2 = 1$ en la forma

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}\,\hat{\rho}^2 &= \sum_{\alpha}\sum_{k,l} w_k w_l \left\langle \alpha \right| \left.k\right\rangle \left\langle k \right| \left.l\right\rangle \left\langle l \right| \left.\alpha\right\rangle \\ &= \sum_{k,l} w_k w_l \left\langle k \right| \left.l\right\rangle \sum_{\alpha} \left\langle l \right| \left.\alpha\right\rangle \left\langle \alpha \right| \left.k\right\rangle \\ &= \sum_{k,l} w_k w_l \left\langle k \right| \left.l\right\rangle \left\langle l \right| \left.k\right\rangle = \sum_{k,l} w_k w_l \left|\left\langle k \right| \left.l\right\rangle\right|^2. \end{aligned} \tag{XXI.183}$$

Por otra parte, también puede escribirse

$$\mathrm{tr}\,\hat{\rho}^2 = 1 = \left(\sum_k w_k\right)^2 = \sum_{k,l} w_k w_l. \tag{XXI.184}$$

De la comparación de ambos resultados sigue que

$$\sum_{k,l} w_k w_l \left(1 - \left|\left\langle k \right| \left.l\right\rangle\right|^2\right) = 0. \tag{XXI.185}$$

Como todos los estados $|k\rangle$ están normalizados, ninguno de los términos de que consta esta suma puede ser negativo, por lo que cada uno tiene que anularse por separado, lo que conduce a que, o bien al menos alguno de los pesos w_k, w_l se anula, o bien

$$\left|\left\langle k \right| \left.l\right\rangle\right|^2 = \left\langle k \right| \left.l\right\rangle \left\langle l \right| \left.k\right\rangle = 1. \tag{XXI.186}$$

De la desigualdad de Cauchy-Schwarz sabemos que en $\left|\langle k\,|l\rangle\right|^2 \leq \langle k\,|l\rangle\,\langle l\,|k\rangle$ el signo de igualdad se cumple si y sólo si los vectores $|k\rangle$ y $|l\rangle$ son colineales, es decir, $|k\rangle = \lambda_{kl}\,|l\rangle$. En el presente caso, de la normalización de ambos vectores sigue que λ_{kl} tiene módulo 1 y representa una fase. Luego todos los vectores que constituyen la mezcla difieren sólo por una fase, es decir, representan el mismo estado. De estas consideraciones sigue que la matriz de densidad (XXI.182) se reduce a

$$\hat{\rho} = \left|k\right\rangle \left\langle k\right|, \tag{XXI.187}$$

que corresponde al estado puro $|k\rangle$.

XXI.27 Encuentre la matriz de densidad no normalizada $\rho_B = e^{-\beta\hat{H}}$ para una partícula de masa m en una caja de potencial de anchura L, en la representación de coordenadas. En el interior de la caja el potencial es nulo, e infinito en el exterior. Determine su valor límite para $L \to \infty$.

Dentro de la caja de potencial, colocada en $x \in [0, L]$, $y \in [0, L]$, $z \in [0, L]$, cada uno de los posibles estados es de la forma

$$\psi\left(x, y, z\right) = C \exp\left[i\left(k_x x + k_y y + k_z z\right)\right]. \tag{XXI.188}$$

Las condiciones de frontera son

$$k_x L = 2\pi n_x, \quad k_y L = 2\pi n_y, \quad k_z L = 2\pi n_z, \tag{XXI.189}$$

y los eigenvalores de la energía resultan

$$E_n = E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{h^2}{2mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right). \tag{XXI.190}$$

La matriz de densidad en la representación de coordenadas es

$$\begin{aligned}\left\langle \mathbf{r} \mid \hat{\rho} \mid \mathbf{r}' \right\rangle &= \sum_n \langle \mathbf{r} \mid n \rangle\, e^{-\beta E_n} \left\langle n \mid \mathbf{r}' \right\rangle = \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) e^{-\beta E_n} \psi_n^*(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{L^3} \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \sum_{n_z=-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{\beta h^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \right. \\ &\quad \left. + \frac{2\pi i}{L}\left\{ n_x(x-x') + n_y(y-y') + n_z(z-z') \right\} \right], \end{aligned} \tag{XXI.191}$$

donde se ha introducido el coeficiente $1/L^3$ para normalizar la función de onda en el volumen L^3. La expresión (XXI.191) puede ser factorizada en la forma

$$\left\langle \mathbf{r} \mid \hat{\rho} \mid \mathbf{r}' \right\rangle = \left\langle x \mid \hat{\rho}_x \mid x' \right\rangle \left\langle y \mid \hat{\rho}_y \mid y' \right\rangle \left\langle z \mid \hat{\rho}_z \mid z' \right\rangle, \tag{XXI.192}$$

$$\left\langle x \mid \hat{\rho}_x \mid x' \right\rangle = \sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \frac{1}{L} \exp\left[-\frac{\beta h^2}{2mL^2} n_x^2 + \frac{2\pi i}{L} n_x (x-x') \right], \tag{XXI.193}$$

y expresiones análogas para los ejes Oy, Oz.

Para pasar al límite $L \to \infty$, consideramos que, por ejemplo, $n_x/L = k_x/2\pi$, lo que permite escribir $\Delta n_x/L = 1/L \to dk_x/2\pi$, donde Δn_x representa el incremento entre dos valores sucesivos de n_x. De aquí sigue

$$\sum_{n_x=-\infty}^{\infty} \frac{1}{L} \to \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x. \tag{XXI.194}$$

Aplicando este resultado a (XXI.193) se obtiene

$$\begin{aligned}\left\langle x \mid \hat{\rho}_x \mid x' \right\rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \exp\left[-\frac{\beta h^2}{2m} k_x^2 + i k_x (x-x') \right] \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m}{2\beta\hbar^2}(x-x')^2 \right]. \end{aligned} \tag{XXI.195}$$

Para las coordenadas y y z se obtienen expresiones análogas, y la matriz de densidad en la representación de coordenadas resulta la gaussiana

$$\left\langle \mathbf{r} \mid \hat{\rho} \mid \mathbf{r}' \right\rangle = \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left[-\frac{m}{2\beta\hbar^2} \left(\mathbf{r} - \mathbf{r}' \right)^2 \right]. \tag{XXI.196}$$

La densidad de partículas en el interior de la caja (infinitamente grande) es uniforme,

$$\rho(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} \mid \hat{\rho} \mid \mathbf{r} \rangle = \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3/2}. \tag{XXI.197}$$

XXI.28 El hamiltoniano de interacción de un electrón en un campo magnético $\mathbf{B}$ es $\hat{H} = -\mu_B \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}$, con $\hat{\sigma}_i$ las matrices de Pauli y μ_B el magnetón de Bohr. Evalúe:

a) la matriz de densidad en la representación que diagonaliza $\hat{\sigma}_z$,

b) la matriz de densidad en la representación que diagonaliza $\hat{\sigma}_x$,

c) los valores esperados de $\hat{\sigma}_z$ en estas representaciones.

Considere que el campo magnético está dirigido a lo largo del eje Oz.

Podemos escribir la matriz de densidad en la forma dada por la expresión (T21.50),

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\mathrm{tr} e^{-\beta \hat{H}}}, \quad \hat{H} = -\mu_B B \hat{\sigma}_z. \tag{XXI.198}$$

a) Usando la representación usual de las matrices de Pauli (con $\hat{\sigma}_z$ diagonal) se puede escribir sucesivamente

$$\begin{aligned} e^{\beta \mu_B B \hat{\sigma}_z} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\beta \mu_B B)^n \hat{\sigma}_z^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n!} (\beta \mu_B B)^{2n} \hat{\sigma}_z^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} (\beta \mu_B B)^{(2n+1)} \hat{\sigma}_z^{2n+1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n!} (\beta \mu_B B)^{2n} \mathbb{I} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} (\beta \mu_B B)^{(2n+1)} \hat{\sigma}_z, \end{aligned} \tag{XXI.199}$$

o sea

$$e^{\beta \mu_B B \hat{\sigma}_z} = \mathbb{I} \cosh \beta \mu_B B + \hat{\sigma}_z \operatorname{senh} \beta \mu_B B. \tag{XXI.200}$$

De manera explícita, este resultado se escribe

$$\begin{aligned} e^{\beta \mu_B B \hat{\sigma}_z} &= \begin{pmatrix} \cosh \beta \mu_B B + \operatorname{senh} \beta \mu_B B & 0 \\ 0 & \cosh \beta \mu_B B - \operatorname{senh} \beta \mu_B B \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{\beta \mu_B B} & 0 \\ 0 & e^{-\beta \mu_B B} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{XXI.201}$$

Sustituyendo (XXI.201) en (XXI.198) se obtiene para la matriz de densidad normalizada

$$\hat{\rho}(\beta) = \frac{1}{e^{\beta \mu_B B} + e^{-\beta \mu_B B}} \begin{pmatrix} e^{\beta \mu_B B} & 0 \\ 0 & e^{-\beta \mu_B B} \end{pmatrix}. \tag{XXI.202}$$

Sólo en el límite $\beta \to \infty$ (o sea $T \to 0$) esta matriz de densidad describe un estado puro, $\hat{\rho}(\infty) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, que corresponde a polarización total hacia arriba (sobre el eje positivo Oz); para cualquier valor finito de β, $\hat{\rho}(\beta)$ describe una mezcla parcialmente polarizada. El valor esperado de $\hat{\sigma}_z$ es

$$\begin{aligned} \langle \hat{\sigma}_z \rangle &= \mathrm{tr}\,(\hat{\rho} \hat{\sigma}_z) = \frac{1}{e^{\beta \mu_B B} + e^{-\beta \mu_B B}} \mathrm{tr} \left[\begin{pmatrix} e^{\beta \mu_B B} & 0 \\ 0 & e^{-\beta \mu_B B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{e^{\beta \mu_B B} - e^{-\beta \mu_B B}}{e^{\beta \mu_B B} + e^{-\beta \mu_B B}} = \tanh \beta \mu_B B. \end{aligned} \tag{XXI.203}$$

b) La matriz $\hat{\sigma}_x$ se diagonaliza con una transformación de similitud realizada con el operador

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \tag{XXI.204}$$

pues

$$\hat{\sigma}'_x = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{XXI.205}$$

Aplicando esta transformación a la expresión (XXI.202) se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{\rho}' &= \frac{1}{e^{\beta\mu_B B} + e^{-\beta\mu_B B}} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} e^{\beta\mu_B B} & 0 \\ 0 & e^{-\beta\mu_B B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\tanh\beta\mu_B B \\ -\tanh\beta\mu_B B & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{XXI.206}$$

para la matriz de densidad en la representación que diagonaliza a $\hat{\sigma}_x$.

c) En la representación (XXI.206), $\hat{\sigma}_z$ toma la forma

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{XXI.207}$$

y su valor esperado es

$$\begin{aligned} \langle\hat{\sigma}_z\rangle &= \mathrm{tr}\left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\tanh\beta\mu_B B \\ -\tanh\beta\mu_B B & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\right] \\ &= \frac{1}{2}\mathrm{tr} \begin{pmatrix} \tanh\beta\mu_B B & -1 \\ -1 & \tanh\beta\mu_B B \end{pmatrix} = \tanh\left(\beta\mu_B B\right), \end{aligned} \tag{XXI.208}$$

resultado que coincide con (XXI.203), como es de esperar, puesto que los valores medios son independientes de la representación usada para calcularlos.

* **XXI.29** Considere dos sistemas 1 y 2 con espacios de Hilbert $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_2$ y vectores de estado $|\varphi_n(1)\rangle, |\chi_s(2)\rangle$, respectivamente, y un sistema global constituido de la suma $1+2$, cuyo espacio de estados es el producto tensorial $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$; los vectores de este espacio son $|\varphi_n(1)\rangle |\chi_s(2)\rangle$. La matriz de densidad global $\hat{\rho}$ es un operador que actua en $\mathcal{H}$, con elementos de matriz

$$\rho_{ns;n's'} = \langle\varphi_n(1)| \langle\chi_s(2)| \hat{\rho} |\varphi_{n'}(1)\rangle |\chi_{s'}(2)\rangle .$$

Considere el operador de densidad reducido $\hat{\rho}'(1)$ que se obtiene a partir de $\hat{\rho}$ tomando una traza parcial sobre (2), es decir, el operador con elementos de matriz

$$\rho'_{nn'}(1) = \sum_s \langle\varphi_n(1)| \langle\chi_s(2)| \hat{\rho} |\varphi_{n'}(1)\rangle |\chi_s(2)\rangle .$$

Sea ahora $\hat{A}(1)$ un observable que actúa sobre $\mathcal{H}_1$. Determine el valor esperado de esta variable y demuestre que se cumple que

$$\left\langle \hat{A}(1) \right\rangle = \mathrm{tr}\hat{\rho}'(1)\hat{A}(1).$$

Antes de demostrar el resultado solicitado es conveniente familiarizarnos con el operador reducido estudiando algunas características de la descripción. La traza parcial de $\hat{\rho}$ sobre (2) tiene como elementos de matriz a los de la matriz (1) reducida:

$$(\mathrm{tr}_2\rho)_{nn'} = \sum_s \langle\varphi_n(1)|\,\langle\chi_s(2)|\,\hat{\rho}\,|\varphi_{n'}(1)\rangle\,|\chi_s(2)\rangle = \sum_s \rho_{ns;n's} = \rho'_{nn'}(1). \tag{XXI.209}$$

De aquí es claro que

$$\mathrm{tr}\,\rho = \mathrm{tr}_1(\mathrm{tr}_2\hat{\rho}) = \mathrm{tr}_2(\mathrm{tr}_1\hat{\rho}). \tag{XXI.210}$$

Por lo tanto, la traza de $\hat{\rho}'(1)$ es igual a la unidad (lo mismo sucede con el operador reducido (2), $\hat{\rho}'(2) = \mathrm{tr}_1(\rho)$). Se puede demostrar también que este operador es hermitiano y, más en general, que satisface todas las propiedades para ser considerado un operador de densidad.

Para calcular $\left\langle \hat{A}(1)\right\rangle$ observamos que como $\hat{A}(1)$ actúa sobre $\mathcal{H}_1$, su extensión al espacio producto de Hilbert es $\hat{A}(1)\otimes\mathbb{I}(2)$ (véase la sección 10.2 del texto). Por lo tanto,

$$\begin{aligned}
\left\langle \hat{A}(1)\right\rangle &= \mathrm{tr}\,\hat{\rho}\hat{A}(1)\\
&= \sum_{ns}\sum_{n's'}\langle\varphi_n(1)|\langle\chi_s(2)|\,\hat{\rho}\,|\varphi_{n'}(1)\rangle|\chi_{s'}(2)\rangle\langle\varphi_{n'}(1)|\langle\chi_{s'}(2)|\hat{A}(1)\\
&\qquad \otimes\mathbb{I}(2)|\varphi_n(1)\rangle|\chi_s(2)\rangle\\
&= \sum_{ns}\sum_{n's'}\langle\varphi_n(1)|\,\langle\chi_s(2)|\,\hat{\rho}\,|\varphi_{n'}(1)\rangle\,|\chi_{s'}(2)\rangle\,\langle\varphi_{n'}(1)|\,\hat{A}(1)\,|\varphi_n(1)\rangle\\
&\qquad \langle\chi_{s'}(2)|\,\mathbb{I}\,|\chi_s(2)\rangle\\
&= \sum_{nn'}\sum_{ss'}\langle\varphi_n(1)|\,\langle\chi_s(2)|\,\hat{\rho}\,|\varphi_{n'}(1)\rangle\,|\chi_{s'}(2)\rangle\,\langle\varphi_{n'}(1)|\,\hat{A}(1)\,|\varphi_n(1)\rangle\,\delta_{ss'}\\
&= \sum_{nn'}\left[\sum_s\langle\varphi_n(1)|\,\langle\chi_s(2)|\,\hat{\rho}\,|\varphi_{n'}(1)\rangle\,|\chi_s(2)\rangle\right]\langle\varphi_{n'}(1)|\,\hat{A}(1)\,|\varphi_n(1)\rangle\\
&= \sum_{nn'}\rho'_{nn'}(1)\hat{A}_{n'n}(1) = \sum_n\left[\hat{\rho}'(1)\hat{A}(1)\right]_{nn} = \mathrm{tr}\rho'(1)\hat{A}(1), \qquad \text{(XXI.211)}
\end{aligned}$$

donde hemos introducido el operador densidad reducido con elementos de matriz

$$\rho'_{nn'}(1) = \sum_s\langle\varphi_n(1)|\,\langle\chi_s(2)|\,\hat{\rho}\,|\varphi_{n'}(1)\rangle\,|\chi_s(2)\rangle\,. \tag{XXI.212}$$

El resultado anterior demuestra que en efecto se cumple que

$$\left\langle \hat{A}(1)\right\rangle = \mathrm{tr}\hat{\rho}\hat{A}(1) = \mathrm{tr}\rho'(1)\hat{A}(1), \tag{XXI.213}$$

donde la matriz de densidad reducida del sistema (1) está dada por (XXI.212).

Supóngase ahora que la matriz de densidad del sistema global se puede factorizar en la forma

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_1(1)\otimes\hat{\rho}_2(2). \tag{XXI.214}$$

De aquí sigue de inmediato que

$$\mathrm{tr}_2\hat{\rho} = \mathrm{tr}_2\left[\hat{\rho}_1(1)\otimes\hat{\rho}_2(2)\right] = \hat{\rho}_1(1), \tag{XXI.215}$$

y un resultado análogo para $\mathrm{tr}_1\hat{\rho} = \hat{\rho}_2(2)$. Por lo tanto, el operador de densidad (XXI.214) representa una simple yuxtaposición de los sistemas 1 y 2 descritos respectivamente por las densidades $\hat{\rho}_1(1)$ y $\hat{\rho}_2(2)$, sin que exista correlación alguna entre ellos. Si consideramos una densidad más general que no permita la factorización expresada en (XXI.214) debido a la presencia de correlaciones entre los subsistemas 1 y 2, podemos aún construir las cantidades $\hat{\rho}'(1) = \mathrm{tr}_2\hat{\rho}$ y $\hat{\rho}'(2) = \mathrm{tr}_1\hat{\rho}$, y a partir de ellas el operador producto

$$\hat{\rho}' = \hat{\rho}'(1) \otimes \hat{\rho}'(2). \tag{XXI.216}$$

Sin embargo, es claro que en general este operador $\hat{\rho}'$ es diferente del operador original $\hat{\rho}$ dado por (XXI.214). La diferencia se debe al menos a las correlaciones que puedan existir entre los dos subsistemas, las que impiden factorizar $\hat{\rho}$ y que ya no están presentes en la $\hat{\rho}'$ dada por (XXI.216), precisamente por ser factorizable. Nótese que el conocimiento de $\hat{\rho}'(1)$ y de $\hat{\rho}'(2)$ únicamente permite obtener información sobre variables de la forma $\hat{A}(1) \otimes \mathbb{I}(2)$ ó $\mathbb{I}(1) \otimes \hat{A}(2)$, cuyos valores esperados estarán correctamente predichos por la $\hat{\rho}'$ de (XXI.216); pero para obtener los valores esperados de variables más generales es necesario conocer la $\hat{\rho}$ completa.

Si la evolución del operador de densidad global está controlada por la ecuación

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = \left[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)\right], \tag{XXI.217}$$

es en general imposible construir un operador hamiltoniano que se refiera exclusivamente al subsistema (1) y que permita escribir una ecuación de evolución para $\hat{\rho}'(1)$ similar a la anterior. Esto se debe precisamente a los efectos del subsistema (2) sobre el (1) (y viceversa), que hacen que la evolución de cada uno de ellos sea más complicada que si uno estuviera aislado del otro.

XXI.30 Considere un haz de luz descrito por una matriz de densidad $\hat{\rho}$, dirigido sobre el eje Oz. Especifique un conjunto de mediciones que deberían realizarse sobre este haz para determinar $\hat{\rho}$.

Sea I la intensidad del haz. Consideremos como base para su descripción los estados con polarización lineal sobre los ejes Ox y Oy, denotados respectivamente por

$$|\varepsilon_x\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\varepsilon_y\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{XXI.218}$$

En esta base $\hat{\rho}$ tiene la forma

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}, \quad \rho_{22} = 1 - \rho_{11}, \quad \rho_{11} = \rho_{11}^*, \quad \rho_{12} = \rho_{21}^*. \tag{XXI.219}$$

De las condiciones sobre los elementos de matriz sigue que $\hat{\rho}$ contiene sólo tres parámetros independientes. Por lo tanto, se requieren tres datos independientes, que pueden tomarse como las componentes del vector de polarización $\mathbf{P}$ (compárese con los resultados de la sección 21.5 del texto). Un polarizador sobre el plano xOy que forme un ángulo α con el eje Ox permite que pase un haz de intensidad

$$I_\alpha = I\mathrm{tr}\,\hat{\rho}\hat{P}_\alpha, \tag{XXI.220}$$

donde $\hat{P}_\alpha$ es el proyector en la dirección α,

$$\begin{aligned}\hat{P}_\alpha &= |\alpha\rangle\langle\alpha| = (\cos\alpha\,|\varepsilon_x\rangle + \operatorname{sen}\alpha\,|\varepsilon_y\rangle)(\cos\alpha\,\langle\varepsilon_x| + \operatorname{sen}\alpha\,\langle\varepsilon_y|) \\ &= \begin{pmatrix} \cos^2\alpha & \operatorname{sen}\alpha\cos\alpha \\ \operatorname{sen}\alpha\cos\alpha & \operatorname{sen}^2\alpha \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{XXI.221}$$

Sustituyendo se obtiene

$$I_\alpha = I\left[\rho_{11}\cos^2\alpha + (1-\rho_{11})\operatorname{sen}^2\alpha + 2\mathrm{Re}\rho_{12}\operatorname{sen}\alpha\cos\alpha\right]. \tag{XXI.222}$$

Con el polarizador sobre el eje Ox, caracterizado por $\alpha = 0$, se obtiene, aplicando (XXI.222),

$$\rho_{11} = \frac{I_0}{I}. \tag{XXI.223}$$

Podemos alternativamente orientar el polarizador sobre el eje Oy, $\alpha = 90^0$, lo que da

$$\rho_{11} = 1 - \frac{I_{90}}{I}. \tag{XXI.224}$$

Nótese incidentalmente que de aquí y de la expresión anterior sigue que

$$I = I_0 + I_{90}. \tag{XXI.225}$$

Con el polarizador a $\alpha = 45^0$ se obtiene

$$\mathrm{Re}\rho_{12} = \frac{I_{45}}{I} - \frac{1}{2}. \tag{XXI.226}$$

Para determinar el tercer dato requerido, escogemos naturalmente a $\mathrm{Im}\rho_{12}$. Una forma simple de hacerlo es recurrir a la determinación de los estados de polarización circular, definidos por los vectores

$$|\varepsilon(\pm)\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varepsilon_x\rangle \pm i\,|\varepsilon_y\rangle\right) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}, \tag{XXI.227}$$

de tal forma que los correspondientes proyectores resultan

$$\hat{P}_\pm = \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \mp i \\ \pm i & 1 \end{pmatrix}. \tag{XXI.228}$$

Las intensidades observadas dependen del estado de polarización que se escoja medir, y están dadas por

$$I_\pm = I\,\mathrm{tr}\,\hat{\rho}\hat{P}_\pm = \frac{I}{2}\left(1 \mp 2\mathrm{Im}\rho_{12}\right). \tag{XXI.229}$$

De aquí sigue

$$\mathrm{Im}\rho_{12} = \pm\frac{1}{2} \mp \frac{I_\pm}{I}. \tag{XXI.230}$$

Para ser concretos, propongamos que se selecciona medir la polarización derecha. Se tiene

$$\mathrm{Im}\rho_{12} = \frac{1}{2} - \frac{I_+}{I}. \tag{XXI.231}$$

Los tres valores medidos I_0, I_{45} y I_+ determinan completamente la matriz de densidad del estado.

Por ejemplo, cuando el haz es completamente no polarizado debe cumplirse que

$$I_0 = I_{45} = I_{90} = I_+ = I_- = \tfrac{1}{2}I,$$

de donde se obtiene para este caso

$$\rho_{11} = \rho_{22} = \tfrac{1}{2}, \quad \rho_{12} = 0, \quad \Rightarrow \hat{\rho} = \tfrac{1}{2}\mathbb{I}. \tag{XXI.232}$$

Nótese que $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\mathbb{I}$ es también la matriz de densidad que describe el espín de un haz de electrones totalmente despolarizados, según sigue de la expresión (T21.82), $\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \mathbf{P}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})$, con $\mathbf{P} = 0$. Esta matriz describe una mezcla en la que los dos estados que la componen son igualmente probables.

* **XXI.31** En el problema XVII.27 se consideró un átomo con Z electrones, pero con sólo dos niveles de interés, denotados como 1 y 2, e inmerso en un campo de radiación de frecuencia ω, cercana a la frecuencia de transición. Determine, empleando métodos directos, la matriz de densidad del problema y establezca las ecuaciones de movimiento correspondientes. Suponga que el campo externo es monocromático y utilice la aproximación de onda rotatoria.

La función de onda del problema se escribió en la forma

$$\psi = C_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}\varphi_1(x) + C_2(t)e^{-iE_2t/\hbar}\varphi_2(x), \tag{XXI.233}$$

donde $\varphi_1(x)$ y $\varphi_2(x)$ son eigenfunciones atómicas no perturbadas y los coeficientes $C_1(t)$, $C_2(t)$ evolucionan con el tiempo debido a la presencia del campo externo; estos coeficientes satisfacen las ecuaciones

$$i\hbar\dot{C}_1 = C_1H'_{11} + C_2e^{-i\omega_0t}H'_{12}, \tag{XXI.234}$$

$$i\hbar\dot{C}_2 = C_2H'_{22} + C_1e^{i\omega_0t}H'_{21,} \tag{XXI.235}$$

donde $\omega_0 = (E_2 - E_1)/\hbar = \omega_{21}$. El hamiltoniano de interacción del átomo y el campo eléctrico oscilatorio de frecuencia ω se escribió en la forma (despreciando los efectos magnéticos)

$$H' = -\mathbf{D}\cdot\mathbf{E}_0\cos\omega t, \quad \mathbf{D} = -e\sum_{i=1}^{Z}\mathbf{r}_i = -e\mathbf{R}. \tag{XXI.236}$$

Con este hamiltoniano resulta $H'_{11} = H'_{22} = 0$, $H'_{21} = H'^*_{12}$, y el sistema de ecuaciones para las funciones C_i se reduce a

$$\dot{C}_1 = -i\mathcal{V}e^{-i\omega_0t}\cos\omega tC_2, \tag{XXI.237}$$

$$\dot{C}_2 = -i\mathcal{V}^*e^{i\omega_0t}\cos\omega tC_1, \tag{XXI.238}$$

en donde

$$\mathcal{V} = -\frac{1}{\hbar}\mathbf{E}_0\cdot\mathbf{D}_{12}. \tag{XXI.239}$$

La matriz de densidad en la representación x es

$$\begin{aligned}\langle x|\,\hat{\rho}\,|x'\rangle &= \psi(x)\psi^*(x') \\ &= |C_1|^2\varphi_1(x)\varphi_1^*(x') + C_1C_2^*e^{i\omega_0t}\varphi_1(x)\varphi_2^*(x') \\ &\quad + C_2C_1^*e^{-i\omega_0t}\varphi_2(x)\varphi_1^*(x') + |C_2|^2\varphi_2(x)\varphi_2^*(x')\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= |C_1|^2 \langle x\,|1\rangle\langle 1\,|x'\rangle + C_1C_2^* e^{i\omega_0 t}\langle x\,|1\rangle\langle 2\,|x'\rangle \\
&\quad + C_2C_1^* e^{-i\omega_0 t}\langle x\,|2\rangle\langle 1\,|x'\rangle + |C_2|^2\langle x\,|2\rangle\langle 2\,|x'\rangle \\
&= \langle x|\Big(|C_1|^2\,|1\rangle\langle 1| + C_1C_2^* e^{i\omega_0 t}\,|1\rangle \\
&\quad \langle 2| + C_2C_1^* e^{-i\omega_0 t}\,|2\rangle\langle 1| + |C_2|^2\,|2\rangle\langle 2|\Big)\,|x'\rangle\,, \qquad \text{(XXI.240)}
\end{aligned}
$$

de donde sigue

$$
\begin{aligned}
\hat{\rho} &= |C_1|^2\,|1\rangle\langle 1| + C_1C_2^* e^{i\omega_0 t}\,|1\rangle\langle 2| + C_2C_1^* e^{-i\omega_0 t}\,|2\rangle\langle 1| + |C_2|^2\,|2\rangle\langle 2| \\
&= \rho_{11}\,|1\rangle\langle 1| + \rho_{12}e^{i\omega_0 t}\,|1\rangle\langle 2| + \rho_{21}e^{-i\omega_0 t}\,|2\rangle\langle 1| + \rho_{22}\,|2\rangle\langle 2|\,. \qquad \text{(XXI.241)}
\end{aligned}
$$

Comparando, para las componentes del operador de densidad se obtiene

$$\rho_{11} = |C_1|^2\,, \quad \rho_{22} = |C_2|^2\,, \qquad \text{(XXI.242)}$$

$$\rho_{12} = \rho_{21}^* = C_1C_2^*. \qquad \text{(XXI.243)}$$

Las ecuaciones de movimiento para ρ_{ij} siguen directamente de las ecuaciones (XXI.237) y (XXI.238), y son

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = -\frac{d\rho_{22}}{dt} = i\cos\omega t\left(\mathcal{V}^* e^{i\omega_0 t}\rho_{12} - \mathcal{V}e^{-i\omega_0 t}\rho_{21}\right), \qquad \text{(XXI.244)}$$

$$\frac{d\rho_{12}}{dt} = \frac{d\rho_{21}^*}{dt} = i\mathcal{V}\cos\omega t e^{-i\omega_0 t}(\rho_{11} - \rho_{22}). \qquad \text{(XXI.245)}$$

El sistema de ecuaciones (XXI.244)-(XXI.245) se va a resolver en la aproximación de onda rotatoria, es decir, despreciando los términos que oscilan con alta frecuencia $\omega + \omega_0$, frente a aquellos que oscilan más lentamente, con frecuencia $\omega - \omega_0$ y que son los responsables de los fenómenos resonantes en el sistema. Por ejemplo, de la primera de las ecuaciones de movimiento sigue que dentro de esta aproximación se puede escribir

$$
\begin{aligned}
\frac{d\rho_{11}}{dt} &= \frac{i}{2}\left[\mathcal{V}^* e^{i\omega_0 t}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right)\rho_{12} - \mathcal{V}e^{-i\omega_0 t}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right)\rho_{21}\right] \\
&\simeq \frac{i}{2}\left[\mathcal{V}^* e^{i(\omega_0-\omega)t}\rho_{12} - \mathcal{V}e^{-i(\omega_0-\omega)t}\rho_{21}\right]. \qquad \text{(XXI.246)}
\end{aligned}
$$

Todos los términos que contienen el factor $e^{i(\omega_0+\omega)t}$ han sido despreciados. Siguiendo en cada caso este procedimiento, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones de evolución en la aproximación de onda rotatoria:

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = -\frac{d\rho_{22}}{dt} = \frac{i}{2}\mathcal{V}^* e^{i(\omega_0-\omega)t}\rho_{12} - \frac{i}{2}\mathcal{V}e^{-i(\omega_0-\omega)t}\rho_{21}, \qquad \text{(XXI.247)}$$

$$\frac{d\rho_{12}}{dt} = \frac{d\rho_{21}^*}{dt} = \frac{i}{2}\mathcal{V}e^{-i(\omega_0-\omega)t}(\rho_{11} - \rho_{22}). \qquad \text{(XXI.248)}$$

Un sistema de ecuaciones análogo se obtiene en el estudio del movimiento de un espín en el seno de un campo magnético oscilatorio, ecuaciones que fueron derivadas por vez primera por F. Bloch, por lo que son conocidas como *ecuaciones ópticas de Bloch*.

Es posible resolver las ecuaciones ópticas de Bloch sin hacer ninguna aproximación adicional. Para ello conviene introducir las nuevas variables

$$\rho'_{12} = \rho_{12}e^{i(\omega_0-\omega)t}, \quad \rho'_{21} = \rho_{21}e^{-i(\omega_0-\omega)t}, \qquad \text{(XXI.249)}$$

con lo que el sistema de ecuaciones anterior se transforma en

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = -\frac{d\rho_{22}}{dt} = \frac{i}{2}\mathcal{V}^*\rho'_{12} - \frac{i}{2}\mathcal{V}\rho'_{21}, \tag{XXI.250}$$

$$\frac{d\rho'_{12}}{dt} = \frac{d\rho'^*_{21}}{dt} = \frac{i}{2}\mathcal{V}(\rho_{11} - \rho_{22}) + i(\omega_0 - \omega)\rho'_{12}. \tag{XXI.251}$$

De la estructura lineal de estas ecuaciones es claro que las soluciones deben poder expresarse en términos de funciones exponenciales. Dando a cada una de las incógnitas ρ_{ij} o ρ'_{ij} la forma $A_{ij}e^{\zeta t}$ se obtiene la ecuación característica para ζ

$$\zeta^2\left[\zeta^2 + (\omega_0 - \omega)^2 + |\mathcal{V}|^2\right] = 0, \tag{XXI.252}$$

que tiene la raíz doble $\zeta = 0$ y las raíces simples $\zeta = \pm i\omega_r$, con la frecuencia modificada ω_r dada por la ecuación

$$\omega_r = \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + |\mathcal{V}|^2}. \tag{XXI.253}$$

De aquí sigue que las soluciones generales pueden expresarse en la forma

$$\text{Para } \rho_{11} \text{ y } \rho_{22}: \quad \rho_{ii} = \rho_{ii}^{(0)} + \rho_{ii}^{(+)}e^{i\omega_r t} + \rho_{ii}^{(-)}e^{-i\omega_r t}; \tag{XXI.254}$$

$$\text{para } \rho_{12} = \rho_{21}^*: \quad \rho_{12} = \left(\rho_{12}^{(0)} + \rho_{12}^{(+)}e^{i\omega_r t} + \rho_{12}^{(-)}e^{-i\omega_r t}\right)e^{-i(\omega_0-\omega)t}. \tag{XXI.255}$$

Estos resultados muestran que la interacción modifica las frecuencias de oscilación. Las frecuencias de los sistemas desacoplados son ω y ω_0; en presencia del acoplamiento surge la frecuencia ω_r, que depende de la intensidad del campo externo y puede modularse, por lo tanto, actuando sobre dicho campo. Este fenómeno, que da lugar a corrimientos de las frecuencias atómicas (por ejemplo, en el espectro de resonancia fluorescente) controlados por un campo externo, es conocido como *efecto Stark dinámico*.[8]

XXI.32 Determine la distribución de Wigner para una y dos partículas libres, descritas en ambos casos por ondas planas. Suponga en el segundo caso que se trata de una superposición coherente.

La función de Wigner de un estado puro está dada por la ecuación (2) del problema ilustrativo 21.8 del texto, la que se puede escribir en la forma

$$P_W(x,p) = \frac{1}{2\pi}\int \psi^*(x - \frac{1}{2}\hbar s)\psi(x + \frac{1}{2}\hbar s)e^{-ips}ds. \tag{XXI.256}$$

Para una partícula libre la función de onda de momento p_0 es

$$\psi(x,t) = Ne^{ip_0x/\hbar - iEt/\hbar}. \tag{XXI.257}$$

Sustituyendo y simplificando se obtiene (tomamos N real)

$$\begin{aligned} P_{W1}(x,p) &= \frac{N^2}{2\pi}\int e^{-ip_0(x/\hbar - s/2)}e^{ip_0(x/\hbar + s/2)}e^{-ips}ds \\ &= \frac{N^2}{2\pi}\int e^{i(p_0-p)s}ds, \end{aligned} \tag{XXI.258}$$

[8] Mayores detalles pueden verse en Loudon (1983), capítulo 2.

lo que da, efectuando la integración,

$$P_{W1}(x,p) = N^2\delta(p-p_0). \tag{XXI.259}$$

Esta densidad describe partículas distribuidas uniformemente sobre todo el espacio x, con valor fijo p_0 del momento p, lo que está en perfecta correspondencia con las características expresadas por la onda plana (XXI.257). En este caso no hay problema con la positividad de la función de Wigner y (XXI.259) puede tomarse como una densidad de probabilidad en todo el espacio fase, dejando de lado el problema asociado a la normalización en el espacio de coordenadas, que puede tratarse como se discute en el capítulo 4 del texto.

Para el caso de dos partículas libres que forman un estado puro, la función de onda es

$$\psi(x,t) = N_1 e^{ip_1x/\hbar - iE_1t/\hbar} + N_2 e^{ip_2x/\hbar - iE_2t/\hbar}, \tag{XXI.260}$$

con $N_1^2 + N_2^2 = 1$ (tomamos ambos coeficientes como reales). La función de Wigner para este estado puro resulta, procediendo como antes,

$$\begin{aligned} P_{W2}(x,p) &= N_1^2\delta(p-p_1) + N_2^2\delta(p-p_2) \\ &\quad + 2N_1N_2\cos\left(\frac{p_1-p_2}{\hbar}x - \frac{E_1-E_2}{\hbar}t\right)\delta\left(p - \frac{p_1+p_2}{2}\right). \end{aligned} \tag{XXI.261}$$

Además de las dos contribuciones esperadas de cada partícula independiente, aparece un término de interferencia, dado por una onda con velocidad de fase $(E_1-E_2)/(p_1-p_2)$; con $p_1 \neq p_2$ los argumentos de las tres funciones delta son diferentes de cero para diferentes valores, por lo que P_{W2} puede tomar valores negativos. Así pues, no es consistente interpretar P_{W2} como una densidad de probabilidad, a menos que se acepte la discutible noción de probabilidad negativa. Pese a esto, la función (XXI.261) proporciona una descripción correcta del sistema cuántico correspondiente, y puede tratársele *formalmente* como una densidad de probabilidad.

Si se considerara a las dos partículas como totalmente independientes, de tal manera que la función de onda se redujera al producto de las funciones de onda de cada partícula, la función de Wigner del "sistema" se reduciría a su vez al producto de dos funciones del tipo (XXI.259).

XXI.3. Ejercicios

XXI.33 De ejemplos de parejas de cantidades físicas que podrían especificarse para determinar los parámetros libres en el problema XXI.9.

XXI.34 Un sistema puede encontrarse en uno de tres posibles estados. La probabilidad del primer estado es $1/2$ y la del segundo $1/3$. Obtenga la matriz de densidad que describe esta situación.

XXI.35 El estado de un sistema está descrito por la densidad

$$\hat{\rho} = \tfrac{1}{4}\begin{pmatrix} 2+a & i \\ -i & 2-a \end{pmatrix}.$$

¿Qué valores son permitidos para a? ¿Cuándo se trata de un estado puro?

XXI.36 La matriz de densidad que describe un sistema que puede encontrarse en uno de dos estados independientes tiene la forma general dada en la ecuación (XXI.29). Determine la condición que debe satisfacerse para que se trate de un estado puro. Si esta densidad describe un haz de electrones, ¿cuál es el vector de polarización?

XXI.37 Considere una mezcla de la forma $\hat{\rho} = \lambda\hat{\rho}_1 + (1-\lambda)\hat{\rho}_2$, con $0 < \lambda < 1$. Demuestre que la dispersión de una variable dinámica genérica $\hat{A}$ cumple la condición

$$\left\langle (\Delta_\rho \hat{A})^2 \right\rangle \geq \lambda \left\langle (\Delta_{\rho_1} \hat{A})^2 \right\rangle + (1-\lambda) \left\langle (\Delta_{\rho 2} \hat{A})^2 \right\rangle .$$

¿Cuándo se cumple la igualdad?

XXI.38 Demuestre que la ley de evolución del valor esperado de una variable dinámica en un estado descrito por un operador de densidad es análoga a la correspondiente ley para estados puros descritos por un vector de estado.

XXI.39 Suponga que para un sistema de dos partículas de espín $1/2$ se tiene $\left\langle \hat{\sigma}_z^{(1)} \right\rangle = \left\langle \hat{\sigma}_z^{(2)} \right\rangle = 1$. a) Construya un estado puro consistente con estos datos o bien demuestre que no existe ninguno. b) Construya un estado no puro consistente con estos datos o demuestre que no existe ninguno.

XXI.40 Suponga que el operador de densidad de cierto sistema puede ser representado por una matriz $N \times N$. Esta matriz puede ser expresada como una combinación lineal de cualquier conjunto completo $\left\{\Omega^{(r)}, r = 1, \ldots, N^2\right\}$ de matrices $N \times N$ (o sea, una base en el espacio de matrices cuadradas de orden N, formada por N^2 matrices linealmente independientes). Suponga que tales matrices son hermitianas y satisfacen las relaciones de ortogonalidad

$$\mathsf{tr}\left(\Omega^{(r)}\Omega^{(s)}\right) = \delta_{rs}.$$

Demuestre que si se escribe

$$\hat{\rho}_t = \sum_r \hat{\rho}_t^{(r)} \Omega^{(r)},$$

los coeficientes $\hat{\rho}_t^{(r)} \equiv \left\langle \Omega^{(r)} \right\rangle$ satisfacen las siguientes ecuaciones de movimiento

$$\frac{d\hat{\rho}_t^{(s)}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \sum_r \mathsf{tr}\left\{ \hat{H}\left[\Omega^{(s)}, \Omega^{(r)}\right] \right\} \hat{\rho}_t^{(r)}; \qquad s = 1, 2, \ldots, N^2.$$

XXI.41 Muestre que las soluciones generales de las ecuaciones ópticas de Bloch se pueden escribir en la forma (XXI.254)–(XXI.255).

XXI.42 Demuestre que si un átomo de dos niveles se encuentra inicialmente en su estado base, de tal manera que sólo $\rho_{11} \neq 0$ para $t = 0$, la solución de las ecuaciones (XXI.247)-(XXI.248) es

$$\rho_{22} = 1 - \rho_{11} = \frac{|\mathcal{V}|^2}{\omega_r^2} \operatorname{sen}^2 \frac{1}{2}\omega_r t,$$

$$\rho_{12} = \rho_{21}^* = \frac{\mathcal{V}}{\omega_r^2} e^{-i(\omega_0 - \omega)t} \operatorname{sen} \frac{1}{2}\omega_r t \left[-(\omega_0 - \omega) \operatorname{sen} \frac{1}{2}\omega_r t + i\omega_r \cos \frac{1}{2}\omega_r t \right].$$

XXI.43 Muestre que si en la descripción de un átomo de dos niveles en interacción con un campo eléctrico monocromático se toma en cuenta el efecto de la emisión espontánea en la forma en que se señala en el problema XVII.27, en vez de las ecuaciones (XXI.250) y (XXI.251), debe escribirse

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = -\frac{d\rho_{22}}{dt} = \frac{i}{2}\mathcal{V}^*\rho'_{12} - \frac{i}{2}\mathcal{V}\rho'_{21} + 2\gamma\rho_{22},$$

$$\frac{d\rho'_{12}}{dt} = \frac{d\rho'^*_{21}}{dt} = \frac{i}{2}\mathcal{V}(\rho_{11} - \rho_{22}) + i(\omega_0 - \omega)\rho'_{12} - \gamma\rho'_{12}.$$

La solución que corresponde al estado estacionario se obtiene igualando a cero cada una de las cuatro derivadas temporales. Muestre que esta solución estacionaria es

$$\rho_{22} = 1 - \rho_{11} = \frac{\frac{1}{2}\mathcal{V}}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 + \frac{1}{2}|\mathcal{V}|^2},$$

$$\rho_{12} = \rho^*_{21} = -\frac{\frac{1}{4}|\mathcal{V}|^2(\omega_0 - \omega - i\gamma)}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 + \frac{1}{2}|\mathcal{V}|^2}e^{-i(\omega_0-\omega)t}.$$

XXII. Ecuaciones cuánticas relativistas

XXII.1. Problemas del texto

XXII.1 Resuelva la ecuación de Klein-Gordon para un potencial atractivo isotrópico de profundidad V_0 y radio a; determine las condiciones de continuidad en $r = a$. Obtenga el mínimo valor de V_0 para a dada, necesario para ligar una partícula de masa m.

La ecuación de Klein-Gordon para partícula libre (T22.2)

$$\Box\Psi - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\Psi = 0, \tag{XXII.1}$$

$$\Box = \nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}, \tag{XXII.2}$$

puede reexpresarse en términos del 4-vector

$$\hat{p}_\mu = -i\hbar\partial_\mu \tag{XXII.3}$$

en la forma

$$\left(\hat{p}_\mu\hat{p}_\mu + m^2c^2\right)\Psi = 0, \tag{XXII.4}$$

donde el índice μ toma los valores $\mu = 1, 2, 3, 4$ y $x_4 = ict$, por lo que resulta $\Box = -\hat{p}_\mu\hat{p}_\mu/\hbar^2$.

El presente problema requiere extender esta ecuación al caso en que la partícula se encuentra bajo la acción de un potencial central escalar. Para construir esta generalización podemos aplicar el principio de acoplamiento minimal, que se sabe es efectivo tanto en el caso clásico como en el cuántico no relativista, y resulta aplicable también en el contexto relativista. Este principio consiste en hacer las sustituciones

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + ieA_4, \tag{XXII.5}$$

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla \to -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}, \tag{XXII.6}$$

con $A_4 = i\phi$; nótese que el comúnmente llamado "potencial escalar" ϕ es en realidad la cuarta componente del cuadrivector $A_\mu = (\mathbf{A},\, i\phi)$. En términos de este cuadrivector el principio de acoplamiento minimal se expresa en la forma

$$\hat{p}_\mu \to \hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu \tag{XXII.7}$$

y conduce directamente a la ecuación de Klein-Gordon (T22.9) que describe el comportamiento de una partícula en presencia de un campo electromagnético:

$$(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu)(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu)\Psi + m^2c^2\Psi = 0. \tag{XXII.8}$$

Para el estudio de estados estacionarios es conveniente separar las derivadas espaciales de la derivada temporal, por lo que escribimos

$$\sum_{i=1}^{3}\left(\hat{p}_i - \frac{e}{c}A_i\right)^2\Psi + \left(\hat{p}_4 - \frac{e}{c}A_4\right)^2\Psi + m^2c^2\Psi = 0 \tag{XXII.9}$$

y buscamos una solución de la forma

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})\, e^{-iEt/\hbar}. \tag{XXII.10}$$

Con

$$\begin{aligned}\left(\hat{p}_4 - \frac{e}{c}A_4\right)^2\Psi &= \left(-\frac{\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{e}{c}A_4\right)^2\Psi = \left(i\frac{E}{c} - \frac{e}{c}A_4\right)^2\Psi \\ &= -\left(\frac{E}{c} + i\frac{e}{c}A_4\right)^2\Psi,\end{aligned} \tag{XXII.11}$$

la ecuación (XXII.9) toma la forma (eliminando el factor común $e^{-iEt/\hbar}$)

$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi(\mathbf{r}) - \left(\frac{E}{c} + i\frac{e}{c}A_4\right)^2\psi(\mathbf{r}) + m^2c^2\psi(\mathbf{r}) = 0. \tag{XXII.12}$$

Para un potencial escalar central

$$eA_4 = iV(r), \quad \mathbf{A} = 0, \tag{XXII.13}$$

la ecuación (XXII.11) se reduce a

$$c^2\hat{\mathbf{p}}^2\psi(\mathbf{r}) - \left[(E - V(r))^2 - m^2c^4\right]\psi(\mathbf{r}) = 0 \tag{XXII.14}$$

o bien,

$$\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{\hbar^2c^2}\left[(E - V(r))^2 - m^2c^4\right]\psi(\mathbf{r}) = 0. \tag{XXII.15}$$

Ésta es la forma que toma la ecuación estacionaria de Klein-Gordon para un potencial estático central.

La ecuación (XXII.15) se puede resolver por comparación con el problema equivalente de Schrödinger, haciendo la sustitución (véase el ejercicio XXII.21)

$$\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right] \to \frac{1}{\hbar^2c^2}\left[(E - V(r))^2 - m^2c^4\right]. \tag{XXII.16}$$

Desarrollando, la correspondencia entre los valores relativistas y no relativistas, resulta

$$E_{\text{no rel}} \to \frac{E^2 - m^2c^4}{2mc^2}, \tag{XXII.17}$$

$$V_{\text{no rel}} \to \frac{2E - V}{2mc^2}V. \tag{XXII.18}$$

La segunda de estas equivalencias es particularmente interesante, pues muestra cómo se realiza la transición del potencial*escalar* $V_{\text{no rel}}$ al potencial relativista $V = -ieA_4$ (componente temporal de un 4-vector). En particular, el pozo esférico uniforme continúa siendo un pozo esférico uniforme, aunque de profundidad ligeramente modificada; para otros potenciales la dependencia funcional en r es diferente en ambas teorías. Sin embargo, las modificaciones son en general pequeñas, como se aprecia al escribir $E = mc^2 + E_{\text{no rel}}$, de donde sigue que

$$\begin{aligned} \frac{E^2 - m^2c^4}{2mc^2} &= \frac{1}{2mc^2}(E + mc^2)(E - mc^2) \\ &= \frac{1}{2mc^2}(2mc^2 + E_{\text{no rel}})E_{\text{no rel}} \\ &= (1 + \frac{E_{\text{no rel}}}{2mc^2})E_{\text{no rel}}; \qquad \text{(XXII.19)} \\ \frac{2E - V}{2mc^2}V &= \left(1 + \frac{2E_{\text{no rel}} - V}{2mc^2}\right)V. \qquad \text{(XXII.20)} \end{aligned}$$

Es claro que en ambos casos, para energías pequeñas comparadas con la energía propia de reposo, las expresiones relativistas se reducen esencialmente a las no relativistas.

Pasamos ahora a resolver la ecuación (XXII.15), aunque omitiendo detalles ampliamente cubiertos en capítulos anteriores del texto (particularmente el 12 y el 13). Como V depende sólo de la coordenada radial, es conveniente pasar a coordenadas esféricas, en términos de las cuales esta ecuación se escribe

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\,\text{sen}\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\,\text{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{\hbar^2c^2}\left[(E - V(r))^2 - m^2c^4\right]\psi(\mathbf{r}) = 0. \qquad \text{(XXII.21)}$$

Para separar variables ponemos

$$\psi\,(\mathbf{r}) = R\,(r)\,Y(\theta,\varphi), \qquad \text{(XXII.22)}$$

lo que conduce a

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial R}{\partial r} + \frac{r^2}{\hbar^2c^2}\left[(E - V(r))^2 - m^2c^4\right] = -\frac{1}{Y\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\,\text{sen}\,\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta} - \frac{1}{Y\,\text{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}. \qquad \text{(XXII.23)}$$

Esta ecuación es equivalente al par de ecuaciones diferenciales

$$\frac{\hbar^2c^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial R}{\partial r} + \left[(E - V(r))^2 - m^2c^4 - \frac{\lambda}{r^2}\right]R = 0, \qquad \text{(XXII.24)}$$

$$\frac{1}{\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\,\text{sen}\,\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta} + \frac{1}{\text{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} + \frac{\lambda}{\hbar^2c^2}Y = 0, \qquad \text{(XXII.25)}$$

con λ la constante de separación. La ecuación angular (XXII.25) es exactamente la misma que la ecuación (T12.40) para el problema de Schrödinger, y sus soluciones son los armónicos esféricos con $\lambda = \hbar^2c^2l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \ldots$ y $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$, tal como se ve en la sección 12.2 del texto. Con este valor de λ la ecuación radial toma la forma

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \frac{1}{\hbar^2c^2}\left[(E - V\,(r))^2 - m^2c^4\right]R - \frac{l\,(l+1)}{r^2}R = 0. \qquad \text{(XXII.26)}$$

El cambio de variable $R = u(r)/r$ conduce a una versión relativista de la ecuación radial (unidimensional) de Schrödinger; sin embargo y como sigue de (XXII.26), en este caso, en vez de potencial efectivo asociado al término centrífugo, sería más apropiado hablar de una masa efectiva, dada por la combinación de los dos últimos términos.

En el presente caso se tiene, con $V_0 > 0$,

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r \leq a, \\ 0, & r > a. \end{cases} \tag{XXII.27}$$

Para $r \leq a$ se cumple que $(E - V(r))^2 - m^2c^4 > 0$ (suponiendo que la profundidad del pozo excede la energía de ligadura), por lo que (XXII.26) se reduce a

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{\partial R}{\partial \rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) R = 0, \tag{XXII.28}$$

donde se ha puesto

$$\rho = k_1 r, \quad k_1^2 = \frac{(E + V_0)^2 - m^2c^4}{\hbar^2 c^2}, \quad \rho \leq k_1 a. \tag{XXII.29}$$

Para $r > a$ se tiene que $(E - V(r))^2 - m^2c^4 = E^2 - m^2c^4 < 0$, pues la energía de ligadura es negativa, por lo que la energía total debe ser menor que mc^2. Esto hace conveniente escribir la ecuación radial en la forma

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{\partial R}{\partial \rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) R = 0, \tag{XXII.30}$$

con

$$\rho = ik_0 r, \quad k_0^2 = \frac{m^2c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2}, \quad |\rho| > k_0 a. \tag{XXII.31}$$

Como ha sido ya discutido, estas ecuaciones tienen como soluciones las funciones esféricas de Bessel $j_l(\rho)$, las funciones esféricas de Neumann $n_l(\rho)$ y las funciones esféricas de Hankel de primera y segunda especie $h^1(\rho)$, $h^2(\rho)$. Para $r \leq a$ se pueden tomar $j_l(\rho)$ y $n_l(\rho)$ como soluciones linealmente independientes y escribir la solución general en la forma

$$R(r) = Aj_l(k_1 r) + Bn_l(k_1 r). \tag{XXII.32}$$

La condición de que $R(r)$ sea regular en el origen elimina a las funciones de Neumann $n_l(\rho)$, por lo que se toma $B = 0$ y queda

$$R(r) = Aj_l(\rho), \quad r \leq a, \tag{XXII.33}$$

con A la constante de normalización. Para $r > a$ las soluciones que corresponden a estados ligados deben converger en $r \to \infty$, comportamiento que corresponde al de las funciones $h^1(\rho)$, que decaen exponencialmente en el infinito para $\rho = ik_0 r$; por lo tanto, escribimos

$$R(r) = B\left[j_l(\rho) + in_l(\rho)\right] = Bh_l^1(\rho), \quad r > a. \tag{XXII.34}$$

La función $h_l^2(\rho)$ no puede intervenir en la solución porque crece exponencialmente con r.

Los valores propios de la energía se obtienen de la condición de continuidad de la función de onda y de su derivada en $r = a$. Como de costumbre, estas dos condiciones conducen a la condición de continuidad de la derivada logarítmica (la prima indica derivada con respecto al argumento):

$$k_1 \left.\frac{j_l'(\rho)}{j_l(\rho)}\right|_{\rho=k_1 a} = ik_0 \left.\frac{h_l^{1\prime}(\rho)}{h_l^1(\rho)}\right|_{\rho=ik_0 a}. \tag{XXII.35}$$

Analizar esta condición de frontera para l arbitraria es bastante complicado. Sin embargo, podemos considerar el caso especial de los estados s, para los cuales $l = 0$. Usando las expresiones dadas en el apéndice matemático (o en el apéndice A.6 del texto) se puede escribir para este caso

$$j_0(\rho) = \frac{\operatorname{sen}\rho}{\rho}, \quad j_0'(\rho) = \frac{\cos\rho}{\rho} - \frac{\operatorname{sen}\rho}{\rho^2}, \tag{XXII.36}$$

$$h_0^1(\rho) = j_0(\rho) + in_0(\rho) = \frac{\operatorname{sen}\rho}{\rho} - i\frac{\cos\rho}{\rho} = -\frac{i}{\rho}e^{i\rho}, \tag{XXII.37}$$

$$h_0^{1\prime}(\rho) = \frac{e^{i\rho}}{\rho}\left(1 + \frac{i}{\rho}\right), \tag{XXII.38}$$

con lo que la condición (XXII.35) para $l = 0$ se escribe

$$\left(\cos k_1 a - \frac{\operatorname{sen} k_1 a}{k_1 a}\right)\frac{k_1}{\operatorname{sen} k_1 a} = -k_0 e^{-k_0 a}\left(1 + \frac{1}{k_0 a}\right)e^{k_0 a},$$

que se reduce a

$$k_1 a \cot k_1 a = -k_0 a. \tag{XXII.39}$$

Este resultado es análogo al que se obtiene para el pozo esférico uniforme norelativista en la sección 20.6 del texto. Del análisis realizado ahí (y en la sección 6.2 del texto para el caso unidimensional) sabemos que los valores propios de la energía y el número de estados ligados están dados por las intersecciones de las curvas (ponemos $x = k_1 a$),

$$y_1(x) = \cot x, \quad y_2(x) = -\frac{k_0 a}{x}.$$

Para que exista al menos un estado s se requiere que se dé al menos una intersección, lo que impone la condición (véase la ecuación (T20.109) con $l = 0$, $n = 0$)

$$x = k_1 a = \frac{a}{\hbar c}\sqrt{(E + V_0)^2 - m^2c^4} \geq \frac{\pi}{2}. \tag{XXII.40}$$

Cuando la energía de amarre es pequeña frente a la energía en reposo del electrón, esta ecuación da la condición aproximada

$$2mc^2 V_0 + V_0^2 \geq \frac{\pi^2\hbar^2 c^2}{4a^2}. \tag{XXII.41}$$

Escribiendo $E = mc^2 + \Delta E$ (ΔE es la energía de amarre, negativa) se obtiene

$$k_1 = \frac{1}{\hbar c}\sqrt{(mc^2 + \Delta E + V_0)^2 - m^2c^4} = \frac{1}{\hbar c}\sqrt{2mc^2\,(\Delta E + V_0) + (\Delta E + V_0)^2}, \tag{XXII.42}$$

y despreciando $\Delta E + V_0$ frente a $2mc^2$ se obtiene $k_1 \simeq \sqrt{2m\,(\Delta E + V_0)}/\hbar$, que es precisamente la expresión no relativista apropiada para esta variable, con lo que (XXII.40) se reduce a la correspondiente ecuación no relativista (T20.109).

XXII.2 Demuestre explícitamente que las matrices $\hat{\gamma}_\mu$ y $\hat{\alpha}_\mu$ en las representaciones de Dirac-Pauli, Kramers-Weyl y Majorana cumplen las reglas de anticonmutación apropiadas, ecuaciones (T22.19) y (T22.29).

Las matrices 4×4 del álgebra de Dirac pueden construirse a partir de los siguientes elementos:

a) las tres matrices de Pauli 2×2 (a las matrices de dimensión 2×2 se les denota aquí con una prima, para distinguirlas de las matrices 4×4)

$$\hat{\sigma}'_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}'_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}'_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{XXII.43}$$

$$\hat{\sigma}'^2_i = \mathbb{I}'; \quad \hat{\sigma}'_i \hat{\sigma}'_j = \mathbb{I}' \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}'_k; \tag{XXII.44}$$

b) las tres matrices 4×4 $\hat{\rho}_i$ definidas como

$$\hat{\rho}_1 = \begin{pmatrix} \mathbb{O}' & \mathbb{I}' \\ \mathbb{I}' & \mathbb{O}' \end{pmatrix}, \quad \hat{\rho}_2 = \begin{pmatrix} \mathbb{O}' & -i\mathbb{I}' \\ i\mathbb{I}' & \mathbb{O}' \end{pmatrix}, \quad \hat{\rho}_3 = \begin{pmatrix} \mathbb{I}' & \mathbb{O}' \\ \mathbb{O}' & -\mathbb{I}' \end{pmatrix}, \tag{XXII.45}$$

con las propiedades (véase el ejercicio XXII.23):

$$\hat{\rho}_i^2 = \mathbb{I}; \quad \hat{\rho}_i^\dagger = \hat{\rho}_i, \quad \hat{\rho}_i \hat{\rho}_j = -\hat{\rho}_j \hat{\rho}_i; \tag{XXII.46}$$

c) las tres matrices 4×4 $\hat{\sigma}_i$ definidas como

$$\hat{\sigma}_i = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}'_i & 0' \\ 0' & \hat{\sigma}'_i \end{pmatrix}, \tag{XXII.47}$$

con las propiedades

$$\hat{\sigma}_i^2 = \mathbb{I}, \quad \hat{\sigma}_i^\dagger = \hat{\sigma}_i, \quad \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i = 2\mathbb{I}\delta_{ij}, \quad \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \mathbb{I}\delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k. \tag{XXII.48}$$

Además, se cumple también que las matrices $\hat{\sigma}_i$ y $\hat{\rho}_j$ conmutan,

$$\hat{\sigma}_i \hat{\rho}_j = \hat{\rho}_j \hat{\sigma}_i. \tag{XXII.49}$$

En lo sucesivo, el operador identidad $\mathbb{I}$ se escribirá simplemente como 1. Usaremos la convención de que los índices romanos toman los valores 1, 2, 3, mientras que los subíndices griegos toman los valores 1, 2, 3, 4.

a) En la representación de Dirac-Pauli las matrices $\hat{\alpha}_\mu$ y $\hat{\gamma}_\mu$ se definen como sigue:

$$\hat{\alpha}_i = \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_i, \quad \hat{\alpha}_4 = -\hat{\beta}, \quad \hat{\beta} \equiv \hat{\rho}_3; \tag{XXII.50}$$

$$\hat{\gamma}_i = \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_i, \quad \hat{\gamma}_4 = \hat{\rho}_3. \tag{XXII.51}$$

De las definiciones y propiedades anteriores sigue que

$$\hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i = \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_i \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_j + \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_j \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_i = \hat{\rho}_1^2 \left(\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i \right), \tag{XXII.52}$$

lo que con ayuda de (XXII.46) y (XXII.48) se reduce a

$$\hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i = 2\delta_{ij}. \tag{XXII.53}$$

De manera análoga,

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_4+\hat{\alpha}_4\hat{\alpha}_i &= -\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_i\hat{\rho}_3-\hat{\rho}_3\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_i=-\hat{\rho}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_i-\hat{\rho}_3\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_i \\ &= \hat{\rho}_3\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_i-\hat{\rho}_3\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_i=0 \qquad \text{(XXII.54)}\end{aligned}$$

y por último,

$$\hat{\alpha}_4\hat{\alpha}_4+\hat{\alpha}_4\hat{\alpha}_4=2\hat{\rho}_3^2=2. \qquad \text{(XXII.55)}$$

Los resultados (XXII.53), (XXII.54) y (XXII.55) pueden resumirse en la propiedad de anticonmutación

$$\hat{\alpha}_\mu\hat{\alpha}_\nu+\hat{\alpha}_\nu\hat{\alpha}_\mu=2\delta_{\mu\nu}, \qquad \text{(XXII.56)}$$

que es la ecuación (T22.19).

Para obtener las propiedades de las matrices γ_μ se puede proceder de manera similar. Haciendo uso de (XXII.49) escribimos

$$\hat{\gamma}_i\hat{\gamma}_j+\hat{\gamma}_j\hat{\gamma}_i=\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_j+\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_j\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i=\hat{\rho}_2^2\left(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j+\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i\right); \qquad \text{(XXII.57)}$$

de aquí sigue

$$\hat{\gamma}_i\hat{\gamma}_j+\hat{\gamma}_j\hat{\gamma}_i=2\delta_{ij}. \qquad \text{(XXII.58)}$$

Por otra parte,

$$\begin{aligned}\hat{\gamma}_i\hat{\gamma}_4+\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_i &= \hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i\hat{\rho}_3+\hat{\rho}_3\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i=\hat{\rho}_2\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_i+\hat{\rho}_3\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i \qquad \text{(XXII.59)} \\ &= \hat{\rho}_2\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_i-\hat{\rho}_2\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_i=0 \qquad \text{(XXII.60)}\end{aligned}$$

y por último,

$$\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_4+\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_4=2\hat{\rho}_3^2=2. \qquad \text{(XXII.61)}$$

Las propiedades (XXII.58), (XXII.60) y (XXII.61) se resumen en la relación de anticonmutación

$$\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\nu+\hat{\gamma}_\nu\hat{\gamma}_\mu=2\delta_{\mu\nu}, \qquad \text{(XXII.62)}$$

que corresponde a la ecuación (T22.29) del texto.

b) La representación de Kramers o Weyl utiliza las definiciones alternas

$$\hat{\alpha}_i=\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_i, \quad \hat{\alpha}_4=-\hat{\beta}=-\hat{\rho}_1; \qquad \text{(XXII.63)}$$

$$\hat{\gamma}_i=-\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i, \quad \hat{\gamma}_4=\hat{\rho}_1. \qquad \text{(XXII.64)}$$

Procediendo como en el inciso anterior, se obtiene

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_j+\hat{\alpha}_j\hat{\alpha}_i &= \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_i\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_j+\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_j\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_i=\hat{\rho}_3^2(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j+\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i)=2\delta_{ij}, \qquad \text{(XXII.65)} \\ \hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_4+\hat{\alpha}_4\hat{\alpha}_i &= -\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_i\hat{\rho}_1-\hat{\rho}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_i=-\hat{\rho}_3\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_i-\hat{\rho}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_i \\ &= \hat{\rho}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_i-\hat{\rho}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_i=0, \qquad \text{(XXII.66)} \\ \hat{\alpha}_4\hat{\alpha}_4+\hat{\alpha}_4\hat{\alpha}_4 &= 2\hat{\rho}_1^2=2. \qquad \text{(XXII.67)}\end{aligned}$$

Vemos que en esta representación se satisface la misma propiedad de anticonmutación (XXII.56). De manera análoga sigue que

$$\hat{\gamma}_i\hat{\gamma}_j+\hat{\gamma}_j\hat{\gamma}_i=\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_j+\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_j\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i=\hat{\rho}_2^2(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j+\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i)=2\delta_{ij}, \qquad \text{(XXII.68)}$$

$$\hat{\gamma}_i\hat{\gamma}_4+\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_i=-\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i\hat{\rho}_1-\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i=-\hat{\rho}_2\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_i-\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i=0, \qquad \text{(XXII.69)}$$

$$\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_4=2\hat{\rho}_1^2=2, \qquad \text{(XXII.70)}$$

recuperándose la regla de anticonmutación (XXII.62).

c) En la representación de Majorana se define

$$\hat{\alpha}_1 = \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_1, \quad \hat{\alpha}_2 = -\hat{\rho}_1, \quad \hat{\alpha}_3 = \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_3, \quad \hat{\alpha}_4 = -\hat{\beta} = -\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2; \tag{XXII.71}$$

$$\hat{\gamma}_1 = -\hat{\sigma}_3, \quad \hat{\gamma}_2 = \hat{\rho}_2\hat{\sigma}_2, \quad \hat{\gamma}_3 = \hat{\sigma}_1, \quad \hat{\gamma}_4 = \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2. \tag{XXII.72}$$

De las definiciones resulta que

$$2\hat{\alpha}_1\hat{\alpha}_1 = 2\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_1 = 2\hat{\rho}_3^2\hat{\sigma}_1^2 = 2, \tag{XXII.73}$$

$$2\hat{\alpha}_2\hat{\alpha}_2 = 2\hat{\rho}_1^2 = 2, \tag{XXII.74}$$

$$2\hat{\alpha}_3\hat{\alpha}_3 = 2\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_3\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_3 = 2\hat{\rho}_3^2\hat{\sigma}_3^2 = 2, \tag{XXII.75}$$

$$2\hat{\alpha}_4\hat{\alpha}_4 = 2\hat{\beta}^2 = 2, \tag{XXII.76}$$

$$\hat{\alpha}_1\hat{\alpha}_2 + \hat{\alpha}_2\hat{\alpha}_1 = -\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_1\hat{\rho}_1 - \hat{\rho}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_1 = -\hat{\rho}_3\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_1 - \hat{\rho}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_1 = 0, \tag{XXII.77}$$

$$\hat{\alpha}_1\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3\hat{\alpha}_1 = \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_3 + \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_3\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_1 = \hat{\rho}_3^2(\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_3 + \hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_1) = 0, \tag{XXII.78}$$

$$\hat{\alpha}_1\hat{\alpha}_4 + \hat{\alpha}_4\hat{\alpha}_1 = -\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2 - \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_1 = -\hat{\rho}_3^2(\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 + \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1) = 0, \tag{XXII.79}$$

$$\hat{\alpha}_2\hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3\hat{\alpha}_2 = -\hat{\rho}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_3 - \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_3\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_3\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_3 - \hat{\rho}_3\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_3 = 0, \tag{XXII.80}$$

$$\hat{\alpha}_2\hat{\alpha}_4 + \hat{\alpha}_4\hat{\alpha}_2 = \hat{\rho}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2 + \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2 - \hat{\rho}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2 = 0, \tag{XXII.81}$$

$$\hat{\alpha}_3\hat{\alpha}_4 + \hat{\alpha}_4\hat{\alpha}_3 = -\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_3\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2 - \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_3 = -\hat{\rho}_3^2(\hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_2 + \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3) = 0. \tag{XXII.82}$$

Luego en esta representación también se satisface la regla de anticonmutación (XXII.56). De manera enteramente similar se obtiene que

$$2\hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_1 = 2\hat{\sigma}_3^2 = 2, \tag{XXII.83}$$

$$2\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_2 = 2\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_2\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_2 = 2\hat{\rho}_2^2\hat{\sigma}_2^2 = 2, \tag{XXII.84}$$

$$2\hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_3 = 2\hat{\sigma}_1^2 = 2, \tag{XXII.85}$$

$$2\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_4 = 2\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2 = 2\hat{\rho}_3^2\hat{\sigma}_2^2 = 2, \tag{XXII.86}$$

$$\hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_2 + \hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_1 = -\hat{\sigma}_3\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_2 - \hat{\rho}_2\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3 = -\hat{\rho}_2(\hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_2 + \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3) = 0, \tag{XXII.87}$$

$$\hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_3 + \hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_1 = -\hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_1 - \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_3 = 0, \tag{XXII.88}$$

$$\hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_4 + \hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_1 = -\hat{\sigma}_3\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2 - \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3 = -\hat{\rho}_3(\hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_2 + \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3) = 0, \tag{XXII.89}$$

$$\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_3 + \hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_2 = \hat{\rho}_2\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_1\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_2 = \hat{\rho}_2(\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2) = 0, \tag{XXII.90}$$

$$\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_4 + \hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_2 = \hat{\rho}_2\hat{\sigma}_2\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2 + \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_2 = \hat{\rho}_2\hat{\rho}_3 + \hat{\rho}_3\hat{\rho}_2 = 0, \tag{XXII.91}$$

$$\hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_4 + \hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_3 = \hat{\sigma}_1\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2 + \hat{\rho}_3\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 = \hat{\rho}_3(\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 + \hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1) = 0, \tag{XXII.92}$$

propiedades que una vez más se resumen en la regla (XXII.62).

XXII.3 Obtenga la matriz $\hat{S}$ que permite pasar de la representación de Dirac-Pauli a la de Kramers-Weyl.

Denotaremos con $\hat{\gamma}_\mu$, $\hat{\gamma}'_\mu$ las matrices $\hat{\gamma}$ en la representación de Dirac-Pauli y de Kramers-Weyl, respectivamente; como se demuestra en el problema anterior, ambos juegos de matrices satisfacen las mismas reglas de conmutación,

$$\{\hat{\gamma}_\mu, \hat{\gamma}_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}, \quad \{\hat{\gamma}'_\mu, \hat{\gamma}'_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}. \tag{XXII.93}$$

El teorema fundamental de Pauli establece que existe una matriz $\hat{S}$ no singular que permite pasar de una representación a la otra, de suerte que se puede escribir (ecuación (T22.46)),

$$\hat{\gamma}'_\mu = \hat{S}\hat{\gamma}_\mu\hat{S}^{-1}. \tag{XXII.94}$$

Multiplicando esta expresión por la derecha por $\hat{S}$ queda

$$\hat{\gamma}'_\mu \hat{S} = \hat{S}\hat{\gamma}_\mu. \tag{XXII.95}$$

Debemos construir la matriz $\hat{S}$ que transforma la representación de Dirac-Pauli,

$$\hat{\gamma}_i = \hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i, \quad \hat{\gamma}_4 = \hat{\rho}_3, \tag{XXII.96}$$

en la representación de Kramers-Weyl,

$$\hat{\gamma}'_i = -\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_i, \quad \hat{\gamma}_4 = \hat{\rho}_1. \tag{XXII.97}$$

Para resolver el problema, buscamos una matriz de la forma

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} a\mathbb{I}' & b\mathbb{I}' \\ c\mathbb{I}' & d\mathbb{I}' \end{pmatrix}, \tag{XXII.98}$$

donde cada elemento es una matriz diagonal de dimensión 2×2. La condición (XXII.95) para $\mu = i$ se traduce, utilizando (XXII.45) y (XXII.47), en

$$\begin{gathered}
\begin{pmatrix} \mathbb{O}' & i\mathbb{I}' \\ -i\mathbb{I}' & \mathbb{O}' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{\sigma}'_i & \mathbb{O}' \\ \mathbb{O}' & \hat{\sigma}'_i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a\mathbb{I}' & b\mathbb{I}' \\ c\mathbb{I}' & d\mathbb{I}' \end{pmatrix} \\
= \begin{pmatrix} a\mathbb{I}' & b\mathbb{I}' \\ c\mathbb{I}' & d\mathbb{I}' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbb{O}' & i\mathbb{I}' \\ -i\mathbb{I}' & \mathbb{O}' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{\sigma}'_i & \mathbb{O}' \\ \mathbb{O}' & \hat{\sigma}'_i \end{pmatrix}, \\
\begin{pmatrix} \mathbb{O}' & i\mathbb{I}' \\ -i\mathbb{I}' & \mathbb{O}' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a\hat{\sigma}'_i & b\hat{\sigma}'_i \\ c\hat{\sigma}'_i & d\hat{\sigma}'_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\mathbb{I}' & b\mathbb{I}' \\ c\mathbb{I}' & d\mathbb{I}' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbb{O}' & -i\hat{\sigma}'_i \\ i\hat{\sigma}'_i & \mathbb{O}' \end{pmatrix}, \\
\begin{pmatrix} ic\hat{\sigma}'_i & id\hat{\sigma}'_i \\ -ia\hat{\sigma}'_i & -ib\hat{\sigma}'_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ib\hat{\sigma}'_i & -ia\hat{\sigma}'_i \\ id\hat{\sigma}'_i & -ic\hat{\sigma}'_i \end{pmatrix}.
\end{gathered} \tag{XXII.99}$$

De aquí que

$$c = b, \quad d = -a. \tag{XXII.100}$$

Por otro lado, la condición

$$\hat{\gamma}'_4 \hat{S} = \hat{S}\hat{\gamma}_4 \tag{XXII.101}$$

lleva a

$$\hat{\rho}_1 \begin{pmatrix} a\mathbb{I}' & b\mathbb{I}' \\ c\mathbb{I}' & d\mathbb{I}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\mathbb{I}' & b\mathbb{I}' \\ c\mathbb{I}' & d\mathbb{I}' \end{pmatrix}\hat{\rho}_3. \tag{XXII.102}$$

Sustituyendo las expresiones (XXII.45) se tiene

$$\begin{gathered}
\begin{pmatrix} \mathbb{O}' & \mathbb{I}' \\ \mathbb{I}' & \mathbb{O}' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a\mathbb{I}' & b\mathbb{I}' \\ c\mathbb{I}' & d\mathbb{I}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\mathbb{I}' & b\mathbb{I}' \\ c\mathbb{I}' & d\mathbb{I}' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbb{I}' & \mathbb{O}' \\ \mathbb{O}' & -\mathbb{I}' \end{pmatrix}, \\
\begin{pmatrix} c\mathbb{I}' & d\mathbb{I}' \\ a\mathbb{I}' & b\mathbb{I}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\mathbb{I}' & -b\mathbb{I}' \\ c\mathbb{I}' & -d\mathbb{I}' \end{pmatrix},
\end{gathered} \tag{XXII.103}$$

de donde

$$c = a, \quad d = -b. \tag{XXII.104}$$

De las igualdades (XXII.100) y (XXII.104) sigue

$$a = b = c = -d. \tag{XXII.105}$$

Así pues, dejando a como parámetro libre,

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} a\mathbb{I}' & a\mathbb{I}' \\ a\mathbb{I}' & -a\mathbb{I}' \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} \mathbb{I}' & \mathbb{I}' \\ \mathbb{I}' & -\mathbb{I}' \end{pmatrix}. \tag{XXII.106}$$

Como las matrices $\hat{\gamma}_\mu$ son hermitianas en ambas representaciones, debe cumplirse

$$\hat{S}\hat{S}^{-1} = \hat{S}\hat{S}^\dagger = 1, \tag{XXII.107}$$

lo que lleva a

$$aa^* \begin{pmatrix} \mathbb{I}' & \mathbb{I}' \\ \mathbb{I}' & -\mathbb{I}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{I}' & \mathbb{I}' \\ \mathbb{I}' & -\mathbb{I}' \end{pmatrix} = 2a^2 \begin{pmatrix} \mathbb{I}' & \mathbb{O}' \\ 0 & \mathbb{I}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{I}' & \mathbb{O}' \\ \mathbb{O}' & \mathbb{I}' \end{pmatrix},$$

de donde

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{XXII.108}$$

En conclusión, la transformación que lleva de la representación de Dirac-Pauli a la de Kramers está dada por

$$\hat{S}_{DP\to K} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathbb{I}' & \mathbb{I}' \\ \mathbb{I}' & -\mathbb{I}' \end{pmatrix}. \tag{XXII.109}$$

Una manera alterna de escribir este resultado se obtiene notando que

$$\hat{S}_{DP\to K} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} \mathbb{O}' & \mathbb{I}' \\ \mathbb{I}' & \mathbb{O}' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbb{I}' & \mathbb{O}' \\ \mathbb{O}' & -\mathbb{I}' \end{pmatrix} \right], \tag{XXII.110}$$

puede escribirse en la forma

$$\hat{S}_{DP\to K} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_3 \right). \tag{XXII.111}$$

Como

$$\hat{\rho}_2\hat{\rho}_1 = \begin{pmatrix} \mathbb{O}' & -i\mathbb{I}' \\ i\mathbb{I}' & \mathbb{O}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{O}' & \mathbb{I}' \\ \mathbb{I}' & \mathbb{O}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\mathbb{I}' & \mathbb{O}' \\ \mathbb{O}' & i\mathbb{I}' \end{pmatrix} = -i\hat{\rho}_3, \tag{XXII.112}$$

se obtiene finalmente

$$\hat{S}_{DP\to K} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\mathbb{I} + i\hat{\rho}_2 \right) \hat{\rho}_1, \tag{XXII.113}$$

que corresponde a la ecuación (T22.54) del texto.

XXII.4 Derive detalladamente la ecuación (T22.61).

Se trata de obtener la ecuación de Heisenberg para las matrices $\hat{\alpha}_k$ que aparecen en la ecuación de Dirac. Como estas matrices no dependen explícitamente del tiempo, una aplicación directa de las ecuaciones de Heisenberg da

$$\dot{\hat{\alpha}}_k = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_D, \hat{\alpha}_k]. \tag{XXII.114}$$

Resulta conveniente escribir el conmutador en la forma

$$[\hat{H}_D, \hat{\alpha}_k] = \hat{H}_D\hat{\alpha}_k - \hat{\alpha}_k\hat{H}_D = \hat{H}_D\hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_k\hat{H}_D - 2\hat{\alpha}_k\hat{H}_D,$$

lo que da

$$\dot{\hat{\alpha}}_k = \frac{i}{\hbar}\left\{\hat{H}_D, \alpha_k\right\} - \frac{2i}{\hbar}\hat{\alpha}_k\hat{H}_D. \tag{XXII.115}$$

Para el caso de partícula libre el hamiltoniano de Dirac es

$$\hat{H}_D = c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\beta}mc^2, \tag{XXII.116}$$

y se tiene que

$$\left\{\hat{H}_D, \hat{\alpha}_k\right\} = c\left\{\hat{\alpha}_i\hat{p}_i, \hat{\alpha}_k\right\} + mc^2\left\{\hat{\beta}, \hat{\alpha}_k\right\} = c\hat{p}_i\left\{\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_k\right\} + mc^2\left\{\hat{\beta}, \hat{\alpha}_k\right\}. \tag{XXII.117}$$

Introduciendo aquí la relación

$$\hat{\beta} = -\hat{\alpha}_4 \tag{XXII.118}$$

se obtiene usando (XXII.56),

$$\left\{\hat{H}_D, \hat{\alpha}_k\right\} = c\hat{p}_i\left\{\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_k\right\} - mc^2\left\{\hat{\alpha}_4, \hat{\alpha}_k\right\} = 2c\hat{p}_i\delta_{ik} = 2c\hat{p}_k. \tag{XXII.119}$$

Con esto la ecuación (XXII.115) toma la forma

$$\dot{\hat{\alpha}}_k = \frac{2i}{\hbar}\left(c\hat{p}_k - \hat{\alpha}_k\hat{H}_D\right), \tag{XXII.120}$$

que es precisamente la ecuación (T22.61).

XXII.5 Derive las ecuaciones (T22.85) y (T22.86) para potenciales centrales. ¿Se cumplirían estas mismas ecuaciones para otros potenciales?

En la construcción de la solución exacta de la ecuación de Dirac para el problema central (sección 22.7 del texto) se encuentra que es conveniente introducir el operador

$$\hat{K} = \hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{L}} + \hbar), \tag{XXII.121}$$

que representa una variante relativista del operador de acoplamiento espín-órbita $\hat{\mathbf{S}}\cdot\hat{\mathbf{L}}$. Se trata de determinar el conmutador de este operador con el momento angular $\hat{\mathbf{J}}$ y el hamiltoniano central, así como sus valores propios.

Calculamos primero el conmutador de $\hat{\mathbf{J}}$ y $\hat{K}$, con $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ y $\hat{\mathbf{S}} = \hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2$:

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathbf{J}}, \hat{K}\right] &= \left[\hat{\mathbf{L}}, \hat{K}\right] + \left[\hat{\mathbf{S}}, \hat{K}\right] \\ &= \left[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{L}}\right] + \hbar\left[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\beta}\right] + \left[\hat{\mathbf{S}}, \hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{L}}\right] + \hbar\left[\hat{\mathbf{S}}, \hat{\beta}\right].\end{aligned} \tag{XXII.122}$$

Para la componente i esto da:

$$\left[\hat{J}_i, \hat{K}\right] = \left[\hat{L}_i, \hat{\beta}\hat{\sigma}_j\hat{L}_j\right] + \hbar\left[\hat{L}_i, \hat{\beta}\right] + \frac{\hbar}{2}\left[\hat{\sigma}_i, \hat{\beta}\hat{\sigma}_j\hat{L}_j\right] + \frac{\hbar^2}{2}\left[\hat{\sigma}_i, \hat{\beta}\right]. \tag{XXII.123}$$

Como la matriz $\hat{\beta} = \hat{\rho}_3$ no depende de las coordenadas, conmuta con el operador de momento angular; además, tomando en cuenta (XXII.49) resulta que también conmuta con el operador de espín. Luego sigue que:

$$\left[\hat{L}_i, \hat{\beta}\right] = 0; \quad \left[\hat{\sigma}_i, \hat{\beta}\right] = 0; \quad \left[\hat{J}_i, \hat{\beta}\right] = 0. \tag{XXII.124}$$

Por otro lado, las matrices de Pauli y el operador de momento angular operan sobre espacios diferentes, por lo que se cumple que

$$\left[\hat{\sigma}_i, \hat{L}_j\right] = 0. \tag{XXII.125}$$

Con esto, (XXII.123) se reduce a

$$\left[\hat{J}_i, \hat{K}\right] = \hat{\beta}\hat{\sigma}_j \left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] + \frac{\hbar}{2}\hat{\beta}\left[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\right]\hat{L}_j. \tag{XXII.126}$$

Tomando en cuenta los conmutadores fundamentales

$$\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k \tag{XXII.127}$$

y

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k, \tag{XXII.128}$$

se concluye que $\hat{K}$ conmuta con $\hat{\mathbf{J}}$:

$$\left[\hat{J}_i, \hat{K}\right] = i\hbar\hat{\beta}\varepsilon_{ijk}\left(\hat{\sigma}_j\hat{L}_k + \hat{L}_j\hat{\sigma}_k\right) = i\hbar\hat{\beta}\left[\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\times\hat{\mathbf{L}}\right)_i + \left(\hat{\mathbf{L}}\times\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)_i\right] = 0, \tag{XXII.129}$$

$$\left[\hat{\mathbf{J}}, \hat{K}\right] = 0. \tag{XXII.130}$$

El hamiltoniano de Dirac para una partícula en un potencial central $V(r)$ se escribe, siguiendo el principio de acoplamiento minimal, tomando a éste como la cuarta componente de un cuadrivector, $V(r) = eA_0(r)$:

$$\hat{H}_D = c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\beta}mc^2 + eA_0(r). \tag{XXII.131}$$

Demostraremos primero que con este hamiltoniano el momento angular total es una constante de movimiento. De las relaciones de conmutación (XXII.124) y del hecho de para cualquier potencial central se cumple

$$\left[\hat{\mathbf{J}}, A_0(r)\right] = 0, \tag{XXII.132}$$

sigue que

$$\left[\hat{\mathbf{J}}, \hat{H}_D\right] = c\left[\hat{\mathbf{J}}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right] = c\left[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\alpha}_j\hat{p}_j\right] + \frac{1}{2}\hbar c\left[\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\alpha}_j\hat{p}_j\right]. \tag{XXII.133}$$

Ahora bien,

$$\left[\hat{L}_i, \hat{\alpha}_j\hat{p}_j\right] = \hat{\alpha}_j\left[\hat{L}_i, \hat{p}_j\right] + \left[\hat{L}_i, \hat{\alpha}_j\right]\hat{p}_j = \hat{\alpha}_j\left[\hat{L}_i, \hat{p}_j\right], \tag{XXII.134}$$

pues por ser las $\hat{\alpha}_i$ matrices constantes se cumple que

$$\left[\hat{L}_i, \hat{\alpha}_j\right] = 0; \tag{XXII.135}$$

además,

$$\left[\hat{L}_i, \hat{p}_j\right] = \varepsilon_{ikl}\left[x_k\hat{p}_l, \hat{p}_j\right] = \varepsilon_{ikl}\left[x_k, \hat{p}_j\right]\hat{p}_l = i\hbar\varepsilon_{ikl}\delta_{jk}\hat{p}_l = i\hbar\varepsilon_{ijl}\hat{p}_l, \tag{XXII.136}$$

con lo que se obtiene

$$\left[\hat{L}_i, \hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{\alpha}_j\hat{p}_k, \tag{XXII.137}$$

es decir,

$$\left[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right] = i\hbar \hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}}. \tag{XXII.138}$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned} [\hat{\sigma}_i, \hat{\alpha}_j \hat{p}_j] &= [\hat{\sigma}_i, \hat{\alpha}_j]\, \hat{p}_j + \hat{\alpha}_j\, [\hat{\sigma}_i, \hat{p}_j] = [\hat{\sigma}_i, \hat{\alpha}_j]\, \hat{p}_j \\ &= \hat{\rho}_1\, [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j]\, \hat{p}_j = 2i\varepsilon_{ijk} \hat{\rho}_1 \hat{p}_j \hat{\sigma}_k = 2i\varepsilon_{ijk} \hat{p}_j \hat{\alpha}_k, \end{aligned} \tag{XXII.139}$$

o sea,

$$[\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}] = 2i \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\boldsymbol{\alpha}}. \tag{XXII.140}$$

Sustituyendo esta última expresión y (XXII.138) en (XXII.133), se obtiene

$$\left[\hat{\mathbf{J}}, \hat{H}_D\right] = i\hbar c\, (\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\boldsymbol{\alpha}}) = 0. \tag{XXII.141}$$

Este resultado muestra que, en efecto, el momento angular total es una constante de movimiento de la ecuación de Dirac para potenciales centrales, como era de esperarse.

Vamos a demostrar ahora que $\hat{K}$ es otra constante de movimiento de la ecuación central de Dirac. Usamos el resultado recién establecido para escribir

$$\left[\hat{H}_D, \hat{\beta} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right] = \left[\hat{H}_D, \hat{\beta}\right] \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{J}} + \hat{\beta} \left[\hat{H}_D, \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right] \cdot \hat{\mathbf{J}}. \tag{XXII.142}$$

Para el primer conmutador tenemos, con $\hat{H}_D$ dado por (XXII.131),

$$\left[\hat{H}_D, \hat{\beta}\right] = c \left[\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{\beta}\right] = c\, [\hat{\rho}_1 \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{\rho}_3] = c\, [\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_3]\, \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}.$$

Como (véase ejercicio XXII.23)

$$[\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_3] = -2i\hat{\rho}_2 = 2\hat{\rho}_1 \hat{\rho}_3, \tag{XXII.143}$$

se obtiene

$$\left[\hat{H}_D, \hat{\beta}\right] = 2c\hat{\rho}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = -2c\hat{\beta} \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \tag{XXII.144}$$

A su vez, se tiene

$$\begin{aligned} \left[\hat{H}_D, \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right] &= c\, [\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}] + mc^2 \left[\hat{\beta}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right] = c\, [\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}] \\ &= c\hat{\rho}_1\, [\hat{\sigma}_j \hat{p}_j, \hat{\sigma}_i]\, \hat{\mathbf{e}}_i = c\hat{\rho}_1\, [\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_i]\, \hat{p}_j \hat{\mathbf{e}}_i = 2ic\varepsilon_{jik} \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_k \hat{p}_j \hat{\mathbf{e}}_i = 2ic(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}}). \end{aligned} \tag{XXII.145}$$

Insertando estos resultados en (XXII.142) queda

$$\left[\hat{H}_D, \hat{\beta} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right] = -2c\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) + 2ic\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot \hat{\mathbf{J}}. \tag{XXII.146}$$

Como se tiene que (véase ejercicio XXII.24)

$$(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) = \hat{\rho}_1 (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) = \hat{\rho}_1 \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{J}} + i\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{J}}), \tag{XXII.147}$$

queda

$$\begin{aligned} \left[\hat{H}_D, \hat{\beta} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right] &= -2c\hat{\beta}\hat{\rho}_1 \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{J}} - 2ic\hat{\beta} \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{J}}) + 2ic\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot \hat{\mathbf{J}} \\ &= -2c\hat{\beta}\hat{\rho}_1 \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{J}} = -2c\hat{\beta}\hat{\rho}_1 \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{L}} - \hbar c\hat{\beta}\hat{\rho}_1 \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = -\hbar c\hat{\beta} \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \end{aligned} \tag{XXII.148}$$

Para escribir la última expresión se tomó en cuenta que

$$\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\nabla \cdot [\mathbf{r} \times (-i\hbar\nabla)] = 0.$$

Sustituyendo aquí la relación (XXII.144) se obtiene

$$\left[\hat{H}_D, \hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right] = \frac{1}{2}\hbar \left[\hat{H}_D, \hat{\beta}\right]. \tag{XXII.149}$$

De aquí sigue de inmediato que

$$\left[\hat{H}_D, \hat{\beta}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{J}} - \frac{1}{2}\hbar\right)\right] = 0. \tag{XXII.150}$$

Como $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = 3$, podemos escribir

$$\begin{aligned} \hat{\beta}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{J}} - \frac{1}{2}\hbar\right) &= \hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{1}{2}\hbar\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 - \frac{1}{2}\hbar\hat{\beta} \\ &= \hat{\beta}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \hbar\right) = \hat{K}. \end{aligned} \tag{XXII.151}$$

Luego la ecuación (XXII.150) dice simplemente que $\hat{K}$ es una integral de movimiento del sistema:

$$\left[\hat{H}_D, \hat{K}\right] = 0. \tag{XXII.152}$$

Estas expresiones no se satisfacen en general para potenciales no centrales, puesto que para ellos el conmutador $\left[\hat{L}_i, A(\mathbf{r})\right]$ normalmente es distinto de cero.

Para determinar los valores propios de $\hat{K}$ es conveniente considerar su cuadrado. Se tiene que

$$\begin{aligned} \hat{K}^2 &= \hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \hbar)\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \hbar) = \hat{\beta}^2(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \hbar)^2 \\ &= (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}})^2 + 2\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \hbar^2. \end{aligned} \tag{XXII.153}$$

Usando la ecuación (T15.10) del texto

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{A}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{B}}) = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{B}} + i\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{A}} \times \hat{\mathbf{B}}), \tag{XXII.154}$$

podemos escribir

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}}) = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + i\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}}) = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \tag{XXII.155}$$

donde tomamos en cuenta la ecuación (XII.25) (o (T12.19))

$$\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar\hat{\mathbf{L}}. \tag{XXII.156}$$

De esta manera la ecuación (XXII.153) se transforma en

$$\begin{aligned} \hat{K}^2 &= \hat{\mathbf{L}}^2 - \hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + 2\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \hbar^2, \\ \hat{K}^2 &= \hat{\mathbf{L}}^2 + \hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \hbar^2. \end{aligned} \tag{XXII.157}$$

Considerando una vez más que $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = 3$ y que $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ y $\hat{\mathbf{L}}$ conmutan, podemos reescribir esta última expresión en la forma

$$\hat{K}^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 + \hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{1}{4}\hbar^2 = \left(\hat{\mathbf{L}} + \frac{1}{2}\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)^2 + \frac{1}{4}\hbar^2, \tag{XXII.158}$$

o sea

$$\hat{K}^2 = \hat{\mathbf{J}}^2 + \frac{1}{4}\hbar^2. \tag{XXII.159}$$

Como $\hat{K}^2$ y $\hat{\mathbf{J}}^2$ conmutan, existen eigenfunciones comunes a estos operadores; llamándolas ψ podemos escribir

$$\hat{\mathbf{J}}^2\psi = \hbar^2 j(j+1)\psi, \tag{XXII.160}$$

$$\hat{K}^2\psi = k^2\psi. \tag{XXII.161}$$

De (XXII.159) sigue que

$$\hat{K}^2\psi = \hat{\mathbf{J}}^2\psi + \frac{1}{4}\hbar^2\psi = \hbar^2\left[j(j+1) + \frac{1}{4}\right]\psi = \hbar^2(j+\frac{1}{2})^2\psi = k^2\psi; \tag{XXII.162}$$

por lo tanto, los valores propios de $\hat{K}$ son

$$k = \pm\hbar(j+\frac{1}{2}). \tag{XXII.163}$$

XXII.6 Demuestre detalladamente la ecuación (T22.101) para los espinores esféricos dados por la ecuación (T22.96).

Se trata de demostrar que los espinores esféricos de la teoría de Dirac satisfacen la ecuación

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{r}})\,\mathcal{Y}^{j_3}_{jl_A,B} = -\mathcal{Y}^{j_3}_{jl_{B,A}}, \quad \hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r}. \tag{XXII.164}$$

Al actuar el operador pseudo escalar $\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{r}}$ sobre un espinor esférico (función de onda angular y de espín, $\mathcal{Y}^{j_3}_{jl_A}$), debe obtenerse una eigenfunción de $\hat{\mathbf{J}}^2$, $\hat{J}_3$ y $\hat{\mathbf{L}}^2$ con los mismos valores de j y j_3 (por la naturaleza escalar de este operador), pero con paridad orbital opuesta (por tratarse de un pseudo tensor), lo que significa intercambiar l_A y l_B (que corresponden a diferentes paridades). Por lo tanto, podemos proponer la ecuación

$$\frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{r}}}{r}\mathcal{Y}^{j_3}_{jl_A} = a\mathcal{Y}^{j_3}_{jl_B}, \tag{XXII.165}$$

donde a es un factor a determinar. Como de (XXII.154) sigue que

$$\left(\frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{r}}}{r}\right)^2 = 1, \tag{XXII.166}$$

deberá cumplirse que

$$a^2 = 1. \tag{XXII.167}$$

En consecuencia, a se reduce a un factor de fase. Para determinar esta fase escogemos un sistema de referencia tal que $\hat{\mathbf{r}}$ quede en la dirección Oz, con lo que el proyector se reduce a

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{r}} = \hat{\sigma}_r = \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{XXII.168}$$

y los armónicos esféricos deberán evaluarse en $\theta = 0$. Analizaremos los dos casos posibles por separado.

a) $k = j + 1/2$. Se tiene que $l_A = j + 1/2$ y $l_B = j - 1/2$, y las expresiones (T22.96) resultan

$$\mathcal{Y}_{jl_A}^{j_3} = -\sqrt{\frac{l_A - j_3 + \frac{1}{2}}{2l_A + 1}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} Y_{l_A}^{j_3 - 1/2} + \sqrt{\frac{l_A + j_3 + \frac{1}{2}}{2l_A + 1}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} Y_{l_A}^{j_3 + 1/2}, \tag{XXII.169}$$

$$\mathcal{Y}_{jl_B}^{j_3} = \sqrt{\frac{l_B + j_3 + \frac{1}{2}}{2l_B + 1}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} Y_{l_B}^{j_3 - 1/2} + \sqrt{\frac{l_B - j_3 + \frac{1}{2}}{2l_B + 1}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} Y_{l_B}^{j_3 + 1/2}. \tag{XXII.170}$$

En el origen ($\cos\theta = 1$) los armónicos esféricos se reducen a

$$Y_l^m(1) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m,0}, \tag{XXII.171}$$

con lo que las ecuaciones (XXII.169) y (XXII.170) se convierten en

$$\mathcal{Y}_{jl_A}^{j_3} = -\sqrt{\frac{l_A - j_3 + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \delta_{j_3 - \frac{1}{2}, 0} + \sqrt{\frac{l_A + j_3 + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \delta_{j_3 + \frac{1}{2}, 0}; \tag{XXII.172}$$

$$\mathcal{Y}_{jl_B}^{j_3} = \sqrt{\frac{l_B + j_3 + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \delta_{j_3 - \frac{1}{2}, 0} + \sqrt{\frac{l_B - j_3 + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \delta_{j_3 + \frac{1}{2}, 0}. \tag{XXII.173}$$

Simplificando, queda

$$\mathcal{Y}_{jl_A}^{j_3} = -\sqrt{\frac{l_A}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{l_A}{4\pi}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{j + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}; \tag{XXII.174}$$

$$\mathcal{Y}_{jl_B}^{j_3} = \sqrt{\frac{l_B + 1}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{l_B + 1}{4\pi}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{j + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{XXII.175}$$

Ahora podemos aplicar el operador pseudo escalar $\hat{\sigma}_z$, lo que da

$$\hat{\sigma}_z \mathcal{Y}_{jl_A}^{j_3} = \sqrt{\frac{j + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = -\sqrt{\frac{j + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = -\mathcal{Y}_{jl_B}^{j_3}, \tag{XXII.176}$$

$$\hat{\sigma}_z \mathcal{Y}_{jl_B}^{j_3} = \sqrt{\frac{j + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{j + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = -\mathcal{Y}_{jl_A}^{j_3}. \tag{XXII.177}$$

De aquí y (XXII.165) sigue que

$$a = -1. \tag{XXII.178}$$

Por lo tanto, para $k = j + 1/2$ se cumple que

$$\frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{r}}}{r} \mathcal{Y}_{jl_{A,B}}^{j_3} = -\mathcal{Y}_{jl_{B,A}}^{j_3}. \tag{XXII.179}$$

b) En el caso restante, $k = -(j + 1/2)$, se tiene $l_A = j - 1/2$ y $l_B = j + 1/2$, y de las ecuaciones (T22.96) sigue

$$\mathcal{Y}^{j_3}_{jl_A} = \sqrt{\frac{l_A + j_3 + \frac{1}{2}}{2l_A + 1}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} Y^{j_3 - 1/2}_{l_A} + \sqrt{\frac{l_A - j_3 + \frac{1}{2}}{2l_A + 1}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} Y^{j_3 + 1/2}_{l_A}, \tag{XXII.180}$$

$$\mathcal{Y}^{j_3}_{jl_B} = -\sqrt{\frac{l_B - j_3 + \frac{1}{2}}{2l_B + 1}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} Y^{j_3 - 1/2}_{l_B} + \sqrt{\frac{l_B + j_3 + \frac{1}{2}}{2l_B + 1}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} Y^{j_3 + 1/2}_{l_B}. \tag{XXII.181}$$

Si ahora sustituimos la expresión (XXII.171), tendremos que

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}^{j_3}_{jl_A} &= \sqrt{\frac{l_A + j_3 + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \delta_{j_3 - \frac{1}{2}, 0} + \sqrt{\frac{l_A - j_3 + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \delta_{j_3 + \frac{1}{2}, 0} \\ &= \sqrt{\frac{j + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \end{aligned} \tag{XXII.182}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}^{j_3}_{jl_B} &= -\sqrt{\frac{l_B - j_3 + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \delta_{j_3 - \frac{1}{2}, 0} + \sqrt{\frac{l_B + j_3 + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \delta_{j_3 + \frac{1}{2}, 0} \\ &= \sqrt{\frac{j + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{XXII.183}$$

De aquí sigue que

$$\hat{\sigma}_z \mathcal{Y}^{j_3}_{jl_A} = \sqrt{\frac{j + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = -\sqrt{\frac{j + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = -\mathcal{Y}^{j_3}_{jl_B}, \tag{XXII.184}$$

$$\hat{\sigma}_z \mathcal{Y}^{j_3}_{jl_B} = \sqrt{\frac{j + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{j + \frac{1}{2}}{4\pi}} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} = -\mathcal{Y}^{j_3}_{jl_A}. \tag{XXII.185}$$

Usando (XXII.165) vuelve a quedar $a = -1$ y concluimos que para $k = j - 1/2$ también se cumple la ecuación (XXII.179), es decir, la (XXII.164) que se deseaba demostrar.

XXII.7 Resuelva el problema XXII.1, haciendo uso esta vez de la ecuación de Dirac. Compare y discuta los resultados.

La ecuación de Dirac para potenciales centrales tiene como solución el espinor dado por la ecuación (T22.97), es decir,

$$\psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi) = \begin{pmatrix} g(r)\, \mathcal{Y}^{j_3}_{jl_A} \\ i f(r)\, \mathcal{Y}^{j_3}_{jl_B} \end{pmatrix}, \tag{XXII.186}$$

en donde las funciones radiales $g(r)$ y $f(r)$ satisfacen las ecuaciones diferenciales acopladas (T22.103)

$$-f' + \frac{k-1}{r} f = \frac{1}{\hbar c} \left[E - V(r) - mc^2 \right] g, \tag{XXII.187}$$

$$g' + \frac{k+1}{r} g = \frac{1}{\hbar c} \left[E - V(r) + mc^2 \right] f. \tag{XXII.188}$$

El número k toma el valor $j + 1/2$ si $l_A = l_B + 1 = j + 1/2$ y $-(j + 1/2)$ si $l_A = l_B - 1 = j - 1/2$, como se demuestra en el texto.

En el presente problema debemos resolver el sistema anterior de ecuaciones radiales para el potencial

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r \leq a, \quad V_0 > 0, \\ 0, & r > a. \end{cases} \tag{XXII.189}$$

Para $r \leq a$ se obtiene

$$-f' + \frac{k-1}{r} f = \frac{1}{\hbar c} \left(E + V_0 - mc^2\right) g, \tag{XXII.190}$$

$$g' + \frac{k+1}{r} g = \frac{1}{\hbar c} \left(E + V_0 + mc^2\right) f. \tag{XXII.191}$$

Para descoplar estas ecuaciones derivamos (XXII.190),

$$-f'' + \frac{k-1}{r} f' - \frac{k-1}{r^2} f = \frac{1}{\hbar c} \left(E + V_0 - mc^2\right) g', \tag{XXII.192}$$

y sustituimos (XXII.191) en el resultado:

$$-f'' + \frac{k-1}{r} f' - \frac{k-1}{r^2} f = \frac{(E+V_0)^2 - m^2c^4}{\hbar^2 c^2} f - \frac{1}{\hbar c} \left(E + V_0 - mc^2\right) \frac{k+1}{r} g. \tag{XXII.193}$$

Eliminamos g de aquí con ayuda de (XXII.190), para obtener

$$f'' + \frac{2}{r} f' + \left[\frac{k(1-k)}{r^2} + \frac{(E+V_0)^2 - m^2c^4}{\hbar^2 c^2} \right] f = 0. \tag{XXII.194}$$

Introduciendo la cantidad

$$\lambda_1^2 = \frac{(E+V_0)^2 - m^2c^4}{\hbar^2 c^2}. \tag{XXII.195}$$

resulta $\lambda_1^2 > 0$ para los estados ligados (en el problema XXII.1 a esta cantidad se le llamó k_1^2) y la ecuación anterior puede escribirse como

$$f'' + \frac{2}{r} f' + \left[\lambda_1^2 - \frac{k(k-1)}{r^2} \right] f = 0. \tag{XXII.196}$$

Con el cambio de variable

$$\rho = \lambda_1 r \tag{XXII.197}$$

(XXII.196) se transforma en

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{df}{d\rho} + \left[1 - \frac{k(k-1)}{\rho^2} \right] f = 0, \tag{XXII.198}$$

cuyas soluciones son las funciones esféricas de Bessel. Los casos posibles son:

a) $k = j + 1/2$; tenemos $k(k-1) = (j - 1/2)(j - 1/2 + 1) = (l_A - 1) l_A$.

b) $k = -(j + 1/2)$; se tiene $k(k-1) = (j + 1/2)(j + 1/2 + 1) = l_B(l_B + 1)$.

La solución la escribimos en la forma (cf. ecuación (T13.93))

$$f = a_1 j_{l_B}(\rho) + a_2 n_{l_B}(\rho), \tag{XXII.199}$$

con

$$l_B = \begin{cases} j - \frac{1}{2}, & \text{si} k = j + \frac{1}{2}, \\ j + \frac{1}{2}, & \text{si} k = -(j + \frac{1}{2}). \end{cases} \tag{XXII.200}$$

Para encontrar la correspondiente función g sustituimos (XXII.199) en(XXII.187):

$$\begin{aligned} -\lambda_1 \left[a_1 \frac{d j_{l_B}(\rho)}{d\rho} + a_2 \frac{d n_{l_B}(\rho)}{d\rho} \right] \\ + \frac{k-1}{r} \left[a_1 j_{l_B}(\rho) + a_2 n_{l_B}(\rho) \right] = \frac{1}{\hbar c} \left(E + V_0 - mc^2 \right) g. \end{aligned} \tag{XXII.201}$$

Empleando las relaciones de recurrencia de las funciones esféricas de Bessel que aparecen en el apéndice matemático (o en el apéndice A.6 del texto), a esta expresión se le puede dar la forma

$$\begin{aligned} &-\lambda_1 \frac{l_B}{2l_B + 1} \left[a_1 j_{l_B - 1}(\rho) + a_2 n_{l_B - 1}(\rho) \right] \\ &+\lambda_1 \frac{l_B + 1}{2l_B + 1} \left[a_1 j_{l_B + 1}(\rho) + a_2 n_{l_B + 1}(\rho) \right] \\ &+\lambda_1 \frac{k-1}{2l_B + 1} \left[a_1 j_{l_B - 1}(\rho) + a_2 n_{l_B - 1}(\rho) \right] \\ &+\lambda_1 \frac{k-1}{2l_B + 1} \left[a_1 j_{l_B + 1}(\rho) + a_2 n_{l_B + 1}(\rho) \right] = \frac{1}{\hbar c} \left(E + V_0 - mc^2 \right) g. \end{aligned} \tag{XXII.202}$$

Para $k = j + 1/2$ se tiene $l_B = j - 1/2 = k - 1$ y se obtiene

$$g = \frac{\hbar c \lambda_1}{E + V_0 - mc^2} \left[a_1 j_{l_B + 1}(\rho) + a_2 n_{l_B + 1}(\rho) \right]. \tag{XXII.203}$$

A su vez, para $k = -(j + 1/2)$, se tiene $l_B = j + 1/2$, es decir $k - 1 = -l_B - 1$, y queda

$$g = -\frac{\hbar c \lambda_1}{E + V_0 - mc^2} \left[a_1 j_{l_B - 1}(\rho) + a_2 n_{l_B - 1}(\rho) \right]. \tag{XXII.204}$$

La pareja de resultados (XXII.203) y (XXII.204) puede ser escrita en la forma más compacta

$$g = \frac{k}{|k|} \frac{\hbar c \lambda_1}{E + V_0 - mc^2} \left[a_1 j_{l_A}(\lambda_1 r) + a_2 n_{l_A}(\lambda_1 r) \right], \tag{XXII.205}$$

con

$$l_A = \begin{cases} j + \frac{1}{2}, & \text{si } k = j + \frac{1}{2}, \\ j - \frac{1}{2}, & \text{si } k = -\left(j + \frac{1}{2} \right). \end{cases} \tag{XXII.206}$$

Para obtener la solución en la región externa $r > a$, basta con sustituir $V_0 = 0$ en (XXII.194), lo que da

$$f'' + \frac{2}{r} f' - \left[\frac{k(k-1)}{r^2} + \frac{m^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} \right] f = 0. \tag{XXII.207}$$

Definiendo

$$\lambda_2^2 = \frac{m^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} \tag{XXII.208}$$

(ésta es la cantidad que fue llamada k_0^2 en el problema XXII.1), para estados ligados resulta $\lambda_2^2 > 0$ y con el cambio de variable

$$\rho = i\lambda_2 r \tag{XXII.209}$$

la ecuación (XXII.207) se puede escribir como

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{df}{d\rho} + \left[1 - \frac{k\,(k-1)}{\rho^2}\right] f = 0. \tag{XXII.210}$$

Al igual que en la región interna $r \leq a$, se tienen las dos posibilidades:

a) $k = j + 1/2$; sigue que $k(k-1) = (j - 1/2)(j - 1/2 + 1) = l_B(l_B + 1)$,

b) $k = -(j + 1/2)$ y en consecuencia $k(k-1) = (j + 1/2)(j + 1/2 + 1)$.

La ecuación (XXII.210) tiene como soluciones las funciones esféricas de Hankel de primera y segunda especie, y podemos escribir la solución general en la forma

$$f = b_1 h_{l_B}^{(1)}\left(i\lambda_2 r\right) + b_2 h_{l_B}^{(2)}\left(i\lambda_2 r\right). \tag{XXII.211}$$

La correspondiente función $g(r)$ se obtiene al sustuir este resultado en (XXII.187):

$$-i\lambda_2\left[b_1\frac{dh_{l_B}^{(1)}(\rho)}{d\rho} + b_2\frac{dh_{l_B}^{(2)}(\rho)}{d\rho}\right] + i\lambda_2\frac{k-1}{\rho}\left[b_1 h_{l_B}^{(1)}(\rho) + b_2 h_{l_B}^{(2)}(\rho)\right] = \frac{1}{\hbar c}\left(E - mc^2\right) g. \tag{XXII.212}$$

El empleo de las relaciones de recurrencia pertinentes conduce a

$$\begin{aligned}
&-i\lambda_2\frac{l_B}{2l_B+1}\left[b_1 h_{l_B-1}^{(1)}\left(i\lambda_2 r\right) + b_2 h_{l_B-1}^{(2)}\left(i\lambda_2 r\right)\right]\\
&+i\lambda_2\frac{l_B+1}{2l_B+1}\left[b_1 h_{l_B+1}^{(1)}\left(i\lambda_2 r\right) + b_2 h_{l_B+1}^{(2)}\left(i\lambda_2 r\right)\right]\\
&+i\lambda_2\frac{k-1}{2l_B+1}\left[b_1 h_{l_B-1}^{(1)}\left(i\lambda_2 r\right) + b_2 h_{l_B-1}^{(2)}\left(i\lambda_2 r\right)\right]\\
&+i\lambda_2\frac{k-1}{2l_B+1}\left[b_1 h_{l_B+1}^{(1)}\left(i\lambda_2 r\right) + b_2 h_{l_B+1}^{(2)}\left(i\lambda_2 r\right)\right] = \frac{1}{\hbar c}\left(E - mc^2\right) g.
\end{aligned} \tag{XXII.213}$$

Para $k = j + 1/2$, $l_B = j - 1/2 = k - 1$ y queda

$$g = \frac{i\hbar c\lambda_2}{E - mc^2}\left[b_1 h_{l_B+1}^{(1)}\left(i\lambda_2 r\right) + b_2 h_{l_B+1}^{(2)}\left(i\lambda_2 r\right)\right]. \tag{XXII.214}$$

Para $k = -(j + 1/2)$, $l_B = j + 1/2$, y $k - 1 = -l_B - 1$, con lo cual resulta

$$g = -\frac{\hbar c i\lambda_2}{E - mc^2}\left[b_1 h_{l_B-1}^{(1)}\left(i\lambda_2 r\right) + b_2 h_{l_B-1}^{(2)}\left(i\lambda_2 r\right)\right]. \tag{XXII.215}$$

Las ecuaciones (XXII.214) y (XXII.215) pueden ser escritas en la forma

$$g = \frac{k}{|k|}\frac{\hbar c i\lambda_2}{E - mc^2}\left[b_1 h_{l_A}^{(1)}\left(i\lambda_2 r\right) + b_2 h_{l_A}^{(2)}\left(i\lambda_2 r\right)\right], \tag{XXII.216}$$

con

$$l_A = \begin{cases} j + \frac{1}{2}, & \text{si } k = j + \frac{1}{2}, \\ j - \frac{1}{2}, & \text{si } k = -\left(j + \frac{1}{2}\right). \end{cases} \tag{XXII.217}$$

Las anteriores son soluciones generales, por lo que aún se requiere imponer las condiciones de frontera apropiadas al problema. En $r = 0$ la función de onda debe permanecer regular, lo que demanda poner $a_2 = 0$. Para que la función de onda decrezca exponencialmente en $r \to \infty$ se ha de imponer la restricción $b_2 = 0$. De esto resulta que la solución para el problema ligado tiene la forma, para $r \leq a$,

$$f = a_1 j_{l_B}(\lambda_1 r), \tag{XXII.218}$$

$$g = a_1 \frac{k}{|k|} \frac{\hbar c \lambda_1}{E + V_0 - mc^2} j_{l_A}(\lambda_1 r), \tag{XXII.219}$$

y para $r > a$,

$$f = b_1 h^{(1)}_{l_B}(i\lambda_2 r), \tag{XXII.220}$$

$$g = b_1 \frac{k}{|k|} \frac{\hbar c i \lambda_2}{E - mc^2} h^{(1)}_{l_A}(i\lambda_2 r), \tag{XXII.221}$$

con l_A y l_B dadas por las expresiones (XXII.200) y (XXII.206). Para garantizar que la solución se empata correctamente en $r = a$ se requiere que

$$a_1 j_{l_B}(\lambda_1 a) = b_1 h^{(1)}_{l_B}(i\lambda_2 a), \tag{XXII.222}$$

$$\frac{\lambda_1 a_1}{E + V_0 - mc^2} j_{l_A}(\lambda_1 a) = \frac{i\lambda_2 b_1}{E - mc^2} h^{(1)}_{l_A}(i\lambda_2 a). \tag{XXII.223}$$

De esta pareja de ecuaciones sigue la condición de consistencia

$$\frac{j_{l_B}(\lambda_1 a)}{j_{l_A}(\lambda_1 a)} = -\frac{i\lambda_1 \left(E - mc^2\right)}{\lambda_2 \left(E + V_0 - mc^2\right)} \frac{h^{(1)}_{l_B}(i\lambda_2 a)}{h^{(1)}_{l_A}(i\lambda_2 a)}. \tag{XXII.224}$$

Los valores propios de la energía para los estados ligados se obtienen de las soluciones de esta ecuación. Sin embargo, la expresión es muy complicada para l_A y l_B arbitrarios, por lo que nos restringiremos al caso más simple posible, $|k| = 1$.

a) Para $k = -1$ resulta $l_A = 0$, $l_B = 1$, y la expresión anterior se reduce a

$$\frac{j_1(\lambda_1 a)}{j_0(\lambda_1 a)} = -\frac{i\lambda_1 \left(E - mc^2\right)}{\lambda_2 \left(E + V_0 - mc^2\right)} \frac{h^{(1)}_1(i\lambda_2 a)}{h^{(1)}_0(i\lambda_2 a)}. \tag{XXII.225}$$

Con el empleo de las expresiones requeridas del apéndice matemático, esta ecuación se reduce a

$$\frac{1}{\lambda_1 a} - \cot \lambda_1 a = -\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \frac{E - mc^2}{E + V_0 - mc^2} \left(1 + \frac{1}{\lambda_2 a}\right), \tag{XXII.226}$$

es decir,

$$\lambda_1 a \cot \lambda_1 a = 1 + \frac{\lambda_1^2}{\lambda_2^2} \frac{E - mc^2}{E + V_0 - mc^2} (\lambda_2 a + 1). \tag{XXII.227}$$

Sustituyendo los valores de λ_1 y λ_2 se obtiene

$$\lambda_1 a \cot \lambda_1 a = 1 - \frac{E + V_0 + mc^2}{E + mc^2} \left(\frac{a}{\hbar c} \sqrt{m^2 c^4 - E^2} + 1 \right), \qquad \text{(XXII.228)}$$

cuyas soluciones dan los valores permitidos de la energía y el número de estados ligados por el pozo.

b) Para $k = 1$, $l_A = 1$ y $l_B = 0$, y queda

$$\frac{j_0(\lambda_1 a)}{j_1(\lambda_1 a)} = \frac{\lambda_1 \left(E - mc^2\right)}{i\lambda_2 \left(E + V_0 - mc^2\right)} \frac{h_0^{(1)}(i\lambda_2 a)}{h_1^{(1)}(i\lambda_2 a)}, \qquad \text{(XXII.229)}$$

que se puede reescribir en la forma

$$\lambda_1 a \cot \lambda_1 a = 1 + \frac{E + V_0 - mc^2}{mc^2 - E} \left(\frac{a}{\hbar c} \sqrt{m^2 c^4 - E^2} + 1 \right), \qquad \text{(XXII.230)}$$

de donde se obtienen los valores permitidos de la energía y el número de estados ligados para este caso.

Si en (XXII.228) se hace la aproximación $\left(E + V_0 + mc^2\right) / \left(E + mc^2\right) \sim 1$, se obtiene

$$\lambda_1 a \cot \lambda_1 a = -\frac{a}{\hbar c} \sqrt{m^2 c^4 - E^2} = -\lambda_2 a. \qquad \text{(XXII.231)}$$

Con la identificación $\lambda_1 = k_1$, $\lambda_2 = k_0$, esta expresión coincide con la que se obtuvo para el mismo caso con la teoría de Klein-Gordon en el problema XXII.1, ecuación (XXII.39); luego el efecto del espín del electrón se reduce para este problema esencialmente a las corrección introducida por el factor que se ha aproximado para pasar de (XXII.230) a (XXII.231). La discrepancia resulta significativa sólo para pozos muy profundos, con V_0/mc^2 no demasiado pequeña respecto de la unidad.

XXII.8 Las reglas de selección para transiciones dipolares que se aplican a la teoría de Dirac son $\Delta l = \pm 1$, $\Delta j = 0, \pm 1$. Determine las frecuencias de las transiciones permitidas entre los estados con $n = 2$ y $n = 3$ para el átomo hidrogenoide en la teoría de Dirac, y compare con los resultados predichos por la teoría de Schrödinger.

En la sección 22.7 del texto se obtiene la fórmula exacta para los niveles de energía de un átomo hidrogenoide, calculada con la teoría de Dirac,

$$E_{nj} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{\left(n - j - \frac{1}{2} + \sqrt{k^2 - \alpha^2 Z^2}\right)^2}}}. \qquad \text{(XXII.232)}$$

Desarrollando esta expresión en serie de potencias de $(Z\alpha)^2$ y reteniendo sólo hasta términos de segundo orden, queda

$$E_{nj} = mc^2 \left[1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + \cdots \right], \qquad \text{(XXII.233)}$$

donde

$$n = n' + |k|, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad \text{(XXII.234)}$$

es el número cuántico principal que determina la energía en la expresión no relativista (XIII.82) (o (T13.51))

$$E_n = -\frac{Z^2 me^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{Z^2\alpha^2 mc^2}{2n^2}. \tag{XXII.235}$$

En comparación, la correspondiente expresión predicha por la ecuación de Klein-Gordon, en ocasiones llamada*expresión relativista de Schrödinger*, está dada por la ecuación (T22.15)

$$E_{nl} = mc^2\left[1 - \frac{Z^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^4\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)\right]. \tag{XXII.236}$$

Tanto en la ecuación (XXII.233) como en la (XXII.236), el tercer término de la derecha representa la corrección relativista a la energía (XXII.235), degenerada respecto de l y j. Es claro que esta fórmula es válida sólo para $k^2 > Z^2\alpha^2$, o sea, para átomos no muy pesados o estados muy excitados en átomos pesados. La comparación entre (XXII.233) y (XXII.236) muestra que la introducción del espín genera la sustitución $l \to j$; no se trata, sin embargo, de un mero cambio numérico, pues para una j dada hay dos posibles valores de l, $l = j \pm 1/2$, por lo que la teoría de Dirac predice un espectro más rico que el que se deriva usando la ecuación de Klein-Gordon. En particular, la ecuación de Dirac rompe la degeneración respecto de j, pero no respecto de l (hasta segundo orden).

Para estudiar las transiciones a partir de los estados con $n = 3$, consideramos que en la fórmula $n = n' + |k|$, n' puede tomar sólo los valores 0, 1, 2, pues $|k| \geq 0$, mientras que k puede tomar los valores $k = \pm(3 - n')$, excepto para $n' = 0$, en cuyo caso sólo puede valer $k = 3$. Tomando en cuenta que

$$k = j(j+1) - l\,(l+1) + \frac{1}{4} = \begin{cases} l+1, & \text{si } j = l + \frac{1}{2}, \\ -l, & \text{si } j = l - \frac{1}{2}, \end{cases} \tag{XXII.237}$$

podemos construir la siguiente tabla para los eigenestados de Dirac correspondientes a $n = 3$ (la notación de los términos es nL_j):

n'	k	l	j	término
0	3	2	$5/2$	$3d_{5/2}$
1	-2	2	$3/2$	$3d_{3/2}$
1	2	1	$3/2$	$3p_{3/2}$
2	-1	1	$1/2$	$3p_{1/2}$
2	1	0	$1/2$	$3s_{1/2}$

(XXII.238)

Para $n = 2$ se obtiene de forma análoga:

n'	k	l	j	término
0	2	1	$3/2$	$2p_{3/2}$
1	-1	1	$1/2$	$2p_{1/2}$
1	1	0	$3/2$	$2s_{3/2}$

(XXII.239)

Con las reglas de selección para transiciones dipolares que se aplican a la teoría de Dirac, $\Delta l = \pm 1$, $\Delta j = 0, \pm 1$, las transiciones permitidas $n = 3 \to n = 2$

resultan:

$$\begin{aligned} &3d_{5/2} \to 2p_{3/2}, \quad 3d_{3/2} \to 2p_{3/2}, \\ &3d_{3/2} \to 2p_{1/2}, \quad 3p_{3/2} \to 2s_{3/2}, \\ &3p_{1/2} \to 2s_{3/2}, \quad 3s_{1/2} \to 2p_{3/2}, \\ &\qquad\qquad\qquad\quad 3s_{1/2} \to 2p_{1/2}. \end{aligned}$$

A cada una de ellas corresponde la frecuencia

$$\begin{aligned} \omega_{3j' \to 2j} &= \frac{E_{3j'} - E_{2j}}{\hbar} \\ &= \frac{mc^2 Z^2 \alpha^2}{2\hbar}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2}\right) + \frac{3}{8}\frac{mc^2 Z^4 \alpha^4}{\hbar}\left(\frac{1}{3^4} - \frac{1}{2^4}\right) \\ &\quad + \frac{mc^2 Z^4 \alpha^4}{2\hbar}\left(\frac{1}{2^3(j+\frac{1}{2})} - \frac{1}{3^3(j'+\frac{1}{2})}\right) \\ &= A - \frac{65}{64 \cdot 27}B + \left(\frac{1}{2^3(j+\frac{1}{2})} - \frac{1}{3^3(j'+\frac{1}{2})}\right)B, \quad \text{(XXII.240)} \end{aligned}$$

donde se introdujeron las abreviaciones

$$A = \frac{5}{72}Z^2\alpha^2\frac{mc^2}{\hbar}, \quad B = \frac{1}{2}Z^4\alpha^4\frac{mc^2}{\hbar}. \tag{XXII.241}$$

La constante A corresponde esencialmente a la frecuencia de transición dada por la teoría de Schrödinger; la contribución proporcional a B da la corrección predicha por la ecuación de Dirac, a segundo orden. Estas correcciones son del orden $Z^2\alpha^2 \sim Z^2 \times 10^{-4}$ respecto a los valores no relativistas dados por A.

La frecuencia de la transición $3d_{5/2} \to 2p_{3/2}$ resulta

$$\omega_1 = A - \frac{65}{64 \cdot 27}B + \left(\frac{1}{2^4} - \frac{1}{3^4}\right)B = A - \frac{65}{64 \cdot 81}B. \tag{XXII.242}$$

Para la transición $3d_{3/2} \to 2p_{3/2}$ se obtiene

$$\omega_2 = A - \frac{65}{64 \cdot 27}B + \left(\frac{1}{2^4} - \frac{1}{3^3 2}\right)B = A + \frac{11}{64 \cdot 27}B. \tag{XXII.243}$$

La transición $3d_{3/2} \to 2p_{1/2}$ da

$$\omega_3 = A - \frac{65}{64 \cdot 27}B + \left(\frac{1}{2^3} - \frac{1}{3^3 2}\right)B = A + \frac{119}{64 \cdot 27}B. \tag{XXII.244}$$

La energía de la transición $3p_{3/2} \to 2s_{3/2}$ es degenerada con la de la transición $3d_{3/2} \to 2p_{3/2}$, pues el valor de l no interviene en las fórmulas de segundo orden. Por lo tanto

$$\omega_4 = A + \frac{11}{64 \cdot 27}B. \tag{XXII.245}$$

Para la transición $3p_{1/2} \to 2s_{3/2}$ queda

$$\omega_5 = A - \frac{65}{64 \cdot 27}B + \left(\frac{1}{2^4} - \frac{1}{3^3}\right)B = A - \frac{19}{64 \cdot 27}B. \tag{XXII.246}$$

La transición $3s_{1/2} \to 2p_{3/2}$ es degenerada con la anterior, por lo que

$$\omega_6 = A - \frac{19}{64 \cdot 27} B. \tag{XXII.247}$$

Por último, para la frecuencia de la transición $3s_{1/2} \to 2p_{1/2}$ resulta

$$\omega_7 = A - \frac{65}{64 \cdot 27} B + \left(\frac{1}{2^3} - \frac{1}{3^3} \right) B = A + \frac{29}{64 \cdot 9} B. \tag{XXII.248}$$

De estos resultados se concluye que la línea no relativista de frecuencia $\sim A$ en realidad se compone de cinco líneas ligeramente separadas, con las frecuencias dadas arriba.

Con propósitos de comparación, consideremos las predicciones de la ecuación de Klein-Gordon que siguen de la ecuación (XXII.236). Con $n = n' + l + 1$, los eigenestados correspondientes a $n = 3$ y $n = 2$ son los que se listan en las tablas adjuntas:

$$n = 3: \qquad \begin{array}{ccc} n' & l & \text{término} \\ 0 & 2 & 3d \\ 1 & 1 & 3p \\ 2 & 0 & 3s \end{array} \tag{XXII.249}$$

$$n = 2: \qquad \begin{array}{ccc} n' & l & \text{término} \\ 0 & 1 & 2p \\ 1 & 0 & 2s \end{array} \tag{XXII.250}$$

Para transiciones dipolares la regla de selección es $\Delta l = \pm 1$, lo que permite 3 líneas en la transición $n = 3 \to n = 2$:

$$3d \to 2p, \quad 3p \to 2s, \quad 3s \to 2p. \tag{XXII.251}$$

Las correspondientes frecuencias son

$$\begin{aligned} \omega_{3l'2l} &= \frac{E_{3l'} - E_{2l}}{\hbar} \\ &= A - \frac{65}{64 \cdot 27} B + \left(\frac{1}{2^3 (l + \frac{1}{2})} - \frac{1}{3^3 (l' + \frac{1}{2})} \right) B. \end{aligned} \tag{XXII.252}$$

Comparando con (XXII.240) vemos que la diferencia con la teoría de Dirac reside en el último término, que discrepa por la sustitución $j \to l, j' \to l'$, es decir, la pérdida de los efectos del espín. Las tres frecuencias de transición resultan:

a) $3d \to 2p$,

$$\omega_1' = A - \frac{65}{64 \cdot 27} B + \left(\frac{1}{2^3 \cdot \frac{3}{2}} - \frac{1}{3^3 \cdot \frac{5}{2}} \right) B = A - \frac{801}{15 \cdot 64 \cdot 27} B. \tag{XXII.253}$$

b) $3p \to 2s$,

$$\omega_2' = A - \frac{65}{64 \cdot 27} B + \left(\frac{1}{2^3 \cdot \frac{1}{2}} - \frac{1}{3^3 \cdot \frac{3}{2}} \right) B = A + \frac{973}{3 \cdot 64 \cdot 27} B. \tag{XXII.254}$$

c) $3s \to 2p$,

$$\omega_3' = A - \frac{65}{64 \cdot 27}B + \left(\frac{1}{2^3 \cdot \frac{3}{2}} - \frac{1}{3^3 \cdot \frac{1}{2}} \right) B = A - \frac{49}{64 \cdot 27}B. \quad \text{(XXII.255)}$$

La ecuación de Klein-Gordon predice así sólo tres líneas y una separación entre ellas un tanto mayor que la dada por la teoría de Dirac. Es claro que una observación detallada del espectro de emisión del átomo permite discriminar entre las tres teorías. El cálculo anterior muestra que las correcciones puramente relativistas (comunes a ambas teorías, la de Klein-Gordon y la de Dirac) son del mismo orden que las debidas al espín del electrón (que aparecen sólo en la segunda de estas teorías). Ésta es la razón por la cual los primeros cálculos relativistas, efectuados con ayuda de la ecuación de Klein-Gordon, resultaron manifiestamente insuficientes para resolver el problema de la determinación correcta del espectro hidrogenoide.

XXII.9 Demuestre que $[\hat{H}_D, \mathbf{a} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}] = 2ic\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{a})$ para $\mathbf{a}$ un vector fijo y $\hat{H}_D$ el hamiltoniano de Dirac de partícula libre.

Si $\hat{H}_D$ es el hamiltoniano de Dirac para partícula libre (XXII.116) y $\mathbf{a}$ representa un vector fijo, $\mathbf{a} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = a_j \hat{\sigma}_j$, su conmutador es

$$\left[\hat{H}_D, \mathbf{a} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right] = \left[\hat{H}_D, a_j \hat{\sigma}_j \right] = ca_j \left[\hat{\alpha}_i \hat{p}_i, \hat{\sigma}_j \right] + mc^2 a_j \left[\hat{\beta}, \hat{\sigma}_j \right]. \quad \text{(XXII.256)}$$

A su vez, como las matrices de Pauli $\hat{\sigma}_j$ y las componentes del momento lineal actúan sobre espacios diferentes, conmutan entre sí,

$$[\hat{p}_i, \hat{\sigma}_j] = 0 \quad \text{(XXII.257)}$$

y, además, como $\hat{\beta} = \hat{\rho}_3$, de la relación (XXII.49) sigue que $[\hat{\beta}, \hat{\sigma}_j] = 0$. Con esto (XXII.256) se reduce a

$$\begin{aligned} \left[\hat{H}_D, \mathbf{a} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right] &= ca_j \left[\hat{\alpha}_i, \hat{\sigma}_j \right] \hat{p}_i = ca_j \hat{\rho}_1 \left[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j \right] \hat{p}_i = 2ica_j \varepsilon_{ijk} \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_k \hat{p}_i \\ &= 2ic\varepsilon_{kij} \hat{\alpha}_k \hat{p}_i a_j = 2ic\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{a}), \end{aligned} \quad \text{(XXII.258)}$$

que es el resultado que se solicita.

XXII.10 Derive detalladamente las ecuaciones (3), (4) y (5) del problema ilustrativo 22.1 del texto.

En el problema ilustrativo 22.1 del texto se utiliza el operador unitario

$$\hat{U} = e^{i\hat{S}} \quad \text{(XXII.259)}$$

con

$$\hat{S} = -\frac{i}{2mc} \hat{\beta} \hat{\alpha}_j \hat{p}_j F\left(|\mathbf{p}| / mc \right) \quad \text{(XXII.260)}$$

y F una función real, para realizar una transformación que permite escribir las soluciones de la ecuación de Dirac para partícula libre en la forma

$$\Psi_+ = \begin{pmatrix} \Psi_A \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{(XXII.261)}$$

si la energía es positiva y

$$\Psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_B \end{pmatrix} \tag{XXII.262}$$

si la energía es negativa. Las fórmulas a demostrar corresponden a las ecuaciones (XXII.264), (XXII.266), (XXII.277) y (XXII.285), las cuales se derivan a continuación.

De la definición de $\hat{S}$ sigue que

$$\begin{aligned} \left[\hat{S}, \hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right] &= \left[\hat{S}, \hat{\beta}\hat{\alpha}_i\hat{p}_i\right] = -\frac{i}{2mc}\left[\hat{\beta}\hat{\alpha}_j\hat{p}_j F\left(|\mathbf{p}|/mc\right), \hat{\beta}\hat{\alpha}_i\hat{p}_i\right] \\ &= -\frac{i}{2mc}\left[\hat{\beta}\hat{\alpha}_j\hat{p}_j, \hat{\beta}\hat{\alpha}_i\hat{p}_i\right] F\left(|\mathbf{p}|/mc\right) \\ &\quad - \frac{i}{2mc}\hat{\beta}\hat{\alpha}_j\hat{p}_j\left[F\left(|\mathbf{p}|/mc\right), \hat{\beta}\hat{\alpha}_i\hat{p}_i\right] = 0, \end{aligned} \tag{XXII.263}$$

puesto que al ser F función sólo de $\mathbf{p}$, conmuta con $\mathbf{p}$. Con esto queda demostrado que

$$\left[\hat{S}, \hat{\beta}\hat{\alpha}_i\hat{p}_i\right] = 0, \tag{XXII.264}$$

que es la ecuación (3) del problema ilustrativo 22.1 del texto.

Por otro lado, se tiene también que

$$\begin{aligned} \left\{\hat{S}, \hat{\beta}\right\} &= -\frac{i}{2mc}\left\{\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}F\left(|\mathbf{p}|/mc\right), \hat{\beta}\right\} \\ &= -\frac{i}{2mc}\left[\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}F\left(|\mathbf{p}|/mc\right)\hat{\beta} + \hat{\beta}^2\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}F\left(|\mathbf{p}|/mc\right)\right] \\ &= -\frac{i}{2mc}\left[\hat{\beta}\hat{\rho}_1(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}})F\left(|\mathbf{p}|/mc\right)\hat{\beta} + (\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})F\left(|\mathbf{p}|/mc\right)\right]. \end{aligned} \tag{XXII.265}$$

La matriz constante $\hat{\beta} = \hat{\rho}_3$ conmuta con el operador $\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}}$ y con F, por lo que podemos escribir, usando $\hat{\rho}_1\hat{\beta} = -\hat{\beta}\hat{\rho}_1$,

$$\begin{aligned} \left\{\hat{S}, \hat{\beta}\right\} &= -\frac{i}{2mc}\left(\hat{\beta}\hat{\rho}_1\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)F\left(|\mathbf{p}|/mc\right) \\ &= -\frac{i}{2mc}\left(-\hat{\rho}_1\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)F\left(|\mathbf{p}|/mc\right) \\ &= -\frac{i}{2mc}\left(-\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)F\left(|\mathbf{p}|/mc\right) = 0, \end{aligned} \tag{XXII.266}$$

que corresponde a la segunda de las ecuaciones (3) del problema ilustrativo 22.1 del texto.

Para seguir adelante, con ayuda de la ecuación (T15.10) escribimos

$$\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)^2 = \hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{p}} = \left|\hat{\mathbf{p}}\right|^2, \tag{XXII.267}$$

de donde sigue que

$$\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)^{2n} = \left[\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)^2\right]^n = \left|\hat{\mathbf{p}}\right|^{2n} \tag{XXII.268}$$

y

$$\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)^{2n+1} = \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)^{2n} = \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)\left|\hat{\mathbf{p}}\right|^{2n}. \tag{XXII.269}$$

De manera compacta, esto se expresa como

$$\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)^n = \begin{cases} \left|\hat{\mathbf{p}}\right|^n, & \text{si } n \text{ es par,} \\ \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)\left|\hat{\mathbf{p}}\right|^{n-1}, & \text{si } n \text{ es impar.} \end{cases} \tag{XXII.270}$$

Por otro lado, de (XXII.45) sigue que

$$\hat{\beta}\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_3\hat{\rho}_1 = i\hat{\rho}_2, \tag{XXII.271}$$

y usando $\hat{\rho}_i^2 = 1$ resulta

$$\left(\hat{\beta}\hat{\rho}_1\right)^2 = -1. \tag{XXII.272}$$

Por lo tanto,

$$\left(\hat{\beta}\hat{\rho}_1\right)^{2n} = (-1)^n, \tag{XXII.273}$$

$$\left(\hat{\beta}\hat{\rho}_1\right)^{2n+1} = (-1)^n \hat{\beta}\hat{\rho}_1. \tag{XXII.274}$$

Alternativamente, escribimos

$$\left(\hat{\beta}\hat{\rho}_1\right)^n = \begin{cases} (-1)^{n/2}, & \text{si } n \text{ es un número par,} \\ (-1)^{(n-1)/2}\,\hat{\beta}\hat{\rho}_1, & \text{si } n \text{ es un número impar.} \end{cases} \tag{XXII.275}$$

Consideramos finalmente el operador

$$\left(\hat{\beta}\hat{\alpha}_i\hat{p}_i\right)^n = \left(\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)^n = \left(\hat{\beta}\hat{\rho}_1\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)^n = \left(\hat{\beta}\hat{\rho}_1\right)^n(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{p}})^n; \tag{XXII.276}$$

sustituyendo los resultados (XXII.270) y (XXII.275) se obtiene

$$\left(\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)^n = \begin{cases} (-1)^{n/2}\,|\hat{\mathbf{p}}|^n, & \text{si } n \text{ es un número par,} \\ (-1)^{(n-1)/2}\,|\hat{\mathbf{p}}|^{n-1}\,\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}, & \text{si } n \text{ es un número impar.} \end{cases} \tag{XXII.277}$$

Ésta es la ecuación (4) del problema ilustrativo 22.1 del texto.

El hamiltoniano en la nueva representación es

$$\hat{H}' = e^{i\hat{S}}\hat{H}e^{-i\hat{S}} = e^{i\hat{S}}\left(c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\beta}mc^2\right)e^{-i\hat{S}} = e^{i\hat{S}}\hat{\beta}\left(c\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + mc^2\right)e^{-i\hat{S}}. \tag{XXII.278}$$

Como (XXII.264) establece que $\hat{S}$ conmuta con $\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}$, podemos escribir la expresión anterior en la forma

$$\hat{H}' = e^{i\hat{S}}\hat{\beta}e^{-i\hat{S}}\left(c\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + mc^2\right). \tag{XXII.279}$$

Por otra parte, de la ecuación (XXII.266) sabemos que $\hat{\beta}$ anticonmuta con $\hat{S}$, lo que nos permite escribir $\hat{\beta}\hat{S} = -\hat{S}\hat{\beta}$, $\hat{\beta}\hat{S}^2 = -\hat{S}\hat{\beta}\hat{S} = \hat{S}^2\hat{\beta}$, etc., y de esto sigue que

$$\begin{aligned} \hat{\beta}e^{-i\hat{S}} &= \hat{\beta}\left[1 - i\hat{S} + \frac{1}{2!}(i\hat{S})^2 - \frac{1}{3!}(i\hat{S})^3 + \cdots\right] \\ &= \left[1 + i\hat{S} + \frac{1}{2!}(i\hat{S})^2 + \frac{1}{3!}(i\hat{S})^3 + \cdots\right]\hat{\beta} = e^{i\hat{S}}\hat{\beta}. \end{aligned} \tag{XXII.280}$$

Con este resultado (XXII.279) se puede reescribir en la forma

$$\hat{H}' = e^{2i\hat{S}}\hat{\beta}\left(c\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + mc^2\right) = e^{2i\hat{S}}\hat{H}. \tag{XXII.281}$$

Ésta es la forma concisa de escribir el nuevo hamiltoniano. Para obtener una expresión más explícita desarrollamos el exponencial como sigue:

$$\begin{aligned} e^{2i\hat{S}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n i^n \hat{S}^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n 2^{2n}}{(2n)!} \hat{S}^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n+1} 2^{2n+1}}{(2n+1)!} \hat{S}^{2n+1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n 2^{2n}}{(2n)!} \frac{i^{2n}}{(2mc)^{2n}} \left(\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right)^{2n} F^{2n} \\ &\quad + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n+1} 2^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{i^{2n+1}}{(2mc)^{2n+1}} \left(\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right)^{2n+1} F^{2n+1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc}\right)^{2n} + \frac{\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{|\mathbf{p}|} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc}\right)^{2n+1} \\ &= \cos \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc} + \frac{\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{|\mathbf{p}|} \operatorname{sen} \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc}. \end{aligned} \tag{XXII.282}$$

De aquí y (XXII.281) sigue que

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \left(\cos \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc} + \frac{\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{|\mathbf{p}|} \operatorname{sen} \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc}\right) \left(c\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\beta} mc^2\right) \\ &= \frac{\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{|\mathbf{p}|} \left(c\,|\mathbf{p}| \cos \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc} - mc^2 \operatorname{sen} \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc}\right) \\ &\quad + \hat{\beta} \left(mc^2 \cos \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc} + \frac{c(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2}{|\mathbf{p}|} \operatorname{sen} \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc}\right). \end{aligned} \tag{XXII.283}$$

Usando la fórmula

$$(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) = \hat{\rho}_1^2 (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) = |\hat{\mathbf{p}}|^2, \tag{XXII.284}$$

obtenemos finalmente

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= c\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \left(\cos \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc} - \frac{mc}{|\mathbf{p}|} \operatorname{sen} \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc}\right) \\ &\quad + \hat{\beta} mc^2 \left(\cos \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc} + \frac{|\mathbf{p}|}{mc} \operatorname{sen} \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc}\right), \end{aligned} \tag{XXII.285}$$

que es la ecuación (5) del problema ilustrativo 22.1 del texto. Una forma alterna de este resultado es

$$\hat{H}' = \hat{H} \cos \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc} + mc^2 \left(-\frac{\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{|\mathbf{p}|} + \beta \frac{|\mathbf{p}|}{mc}\right) \operatorname{sen} \frac{|\mathbf{p}|\, F}{mc}. \tag{XXII.286}$$

XXII.11 Demuestre que del hamiltoniano de Dirac con acoplamiento minimal (con unidades $\hbar = c = 1$)

$$\hat{H}_D = \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}} + \hat{\beta} m + e\phi,$$

con

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A},$$

sigue que

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}} &= \hat{\boldsymbol{\alpha}}, \\ \ddot{\mathbf{r}} = \dot{\hat{\boldsymbol{\alpha}}} &= 2i \left[\hat{\boldsymbol{\pi}} - \hat{\boldsymbol{\alpha}} \left(\hat{H}_D - e\phi\right)\right], \\ \dot{\hat{\boldsymbol{\pi}}} &= e\mathbf{E} + e\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \mathbf{B}. \end{aligned}$$

El hamiltoniano de Dirac para una partícula en un campo electromagnético con acoplamiento minimal es

$$\hat{H}_D = \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}} + \hat{\beta} m + e\phi, \tag{XXII.287}$$

donde

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A} \tag{XXII.288}$$

es el momento canónico y $A_4(\mathbf{x}) = i\phi$.

Aplicando la ecuación de Heisenberg

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + i\left[\hat{H}_D, \hat{F}\right] \tag{XXII.289}$$

a la componente i del vector de posición, se obtiene

$$\frac{dx_i}{dt} = i\left[\hat{\alpha}_j \hat{\pi}_j + \hat{\beta} m + e\phi, x_i\right]. \tag{XXII.290}$$

Puesto que tanto el potencial coulombiano ϕ (que depende sólo de las coordenadas) como las matrices de Dirac conmutan con las variables de posición, $[\phi, x_i] = 0$, $[\hat{\alpha}_j, x_i] = [\hat{\beta}, x_i] = 0$, la expresión anterior se reduce a

$$\frac{dx_i}{dt} = i\left[\hat{\alpha}_j \hat{\pi}_j, x_i\right] = i\hat{\alpha}_j\left[\hat{\pi}_j, x_i\right] = i\hat{\alpha}_j\left[\hat{p}_j - eA_j, x_i\right]. \tag{XXII.291}$$

Como también se cumple que $[A_j, x_i] = 0$, queda simplemente

$$\frac{dx_i}{dt} = i\hat{\alpha}_j\left[\hat{p}_j, x_i\right] = \hat{\alpha}_j \delta_{ij} = \hat{\alpha}_i, \tag{XXII.292}$$

es decir,

$$\dot{\mathbf{r}} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}. \tag{XXII.293}$$

Para determinar la evolución temporal de $\dot{\mathbf{r}}$ escribimos

$$\begin{aligned} \frac{d\dot{\mathbf{r}}}{dt} &= \widehat{\dot{\boldsymbol{\alpha}}} = i\left[\hat{H}_D, \hat{\boldsymbol{\alpha}}\right] = i\left(\hat{H}_D\hat{\boldsymbol{\alpha}} - \hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{H}_D\right) \\ &= i\left(\hat{H}_D\hat{\boldsymbol{\alpha}} + \hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{H}_D - 2\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{H}_D\right) = i\left(\left\{\hat{H}_D, \hat{\boldsymbol{\alpha}}\right\} - 2\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{H}_D\right). \end{aligned} \tag{XXII.294}$$

Como

$$\begin{aligned} \left\{\hat{H}_D, \hat{\alpha}_i\right\} &= \left\{\hat{\alpha}_j\hat{\pi}_j + \hat{\beta} m + e\phi, \hat{\alpha}_i\right\} = \{\hat{\alpha}_j\hat{\pi}_j, \hat{\alpha}_i\} + 2\hat{\alpha}_i e\phi \\ &= \{\hat{\alpha}_j, \hat{\alpha}_i\}\hat{\pi}_j + 2\hat{\alpha}_i e\phi = 2\delta_{ij}\hat{\pi}_j + 2\hat{\alpha}_i e\phi = 2\hat{\pi}_i + 2\hat{\alpha}_i e\phi, \end{aligned}$$

se obtiene

$$\left\{\hat{H}_D, \hat{\boldsymbol{\alpha}}\right\} = 2\hat{\boldsymbol{\pi}} + 2\hat{\boldsymbol{\alpha}} e\phi \tag{XXII.295}$$

y

$$\frac{d\dot{\mathbf{r}}}{dt} = 2i\left[\hat{\boldsymbol{\pi}} - \hat{\boldsymbol{\alpha}}(\hat{H}_D - e\phi)\right]. \tag{XXII.296}$$

Por último, la ecuación de movimiento para el momento canónico $\hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}$ es

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{\pi}}}{dt} = \frac{\partial \hat{\boldsymbol{\pi}}}{\partial t} + i\left[\hat{H}_D, \hat{\boldsymbol{\pi}}\right], \tag{XXII.297}$$

donde $\mathbf{A}$ puede depender del tiempo. De aquí sigue que

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{\pi}}}{dt} = i\left[\hat{H}_D, \hat{\boldsymbol{\pi}}\right] - e\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = i\left[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{p}}\right] - ie\left[\hat{H}_D, \mathbf{A}\right] - e\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \tag{XXII.298}$$

Para calcular el conmutador $\left[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{p}}\right]$ procedemos como sigue:

$$\left[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{p}}\right] = [\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}}, \hat{\mathbf{p}}] + m\left[\hat{\beta}, \hat{\mathbf{p}}\right] + e\,[\phi, \hat{\mathbf{p}}] = [\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}}, \hat{\mathbf{p}}] + e\,[\phi, \hat{\mathbf{p}}]\,; \tag{XXII.299}$$

como $e\,[\phi, \hat{\mathbf{p}}] = -ie\,[\phi, \nabla] = ie(\nabla\phi)$, queda

$$\begin{aligned}\left[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{p}}\right] &= [\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}}, \hat{\mathbf{p}}] + ie\,(\nabla\phi) = [\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{p}}] - e\,[\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{A}, \hat{\mathbf{p}}] + ie\,(\nabla\phi) \\ &= -e\,[\hat{\alpha}_j A_j, \hat{p}_i]\,\hat{\mathbf{e}}_i + ie\,(\nabla\phi) = -e\hat{\alpha}_j\,[A_j, \hat{p}_i]\,\hat{\mathbf{e}}_i + ie\,(\nabla\phi)\,.\end{aligned} \tag{XXII.300}$$

A su vez,

$$\left[\hat{H}_D, \mathbf{A}\right] = [\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}}, \mathbf{A}] + m\left[\hat{\beta}, \mathbf{A}\right] + e\,[\phi, \mathbf{A}] = [\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \mathbf{A}] = \hat{\alpha}_j\,[\hat{p}_j, A_i]\,\hat{\mathbf{e}}_i. \tag{XXII.301}$$

Sustituyendo estas dos últimas expresiones en (XXII.298) se obtiene

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{\boldsymbol{\pi}}}{dt} &= i\,(-e\hat{\alpha}_j[A_j, \hat{p}_i]\hat{\mathbf{e}}_i + ie\nabla\phi) - ie\hat{\alpha}_j[\hat{p}_j, A_i]\hat{\mathbf{e}}_i - e\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \\ &= ie\hat{\alpha}_j\left\{[\hat{p}_i, A_j] - [\hat{p}_j, A_i]\right\}\hat{\mathbf{e}}_i + e\left(-\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right).\end{aligned} \tag{XXII.302}$$

Introduciendo el vector del campo eléctrico dado por

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \tag{XXII.303}$$

se obtiene

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{\pi}}}{dt} = ie\hat{\alpha}_j\left\{[\hat{p}_i, A_j] - [\hat{p}_j, A_i]\right\}\hat{\mathbf{e}}_i + e\mathbf{E}. \tag{XXII.304}$$

Considerando que

$$[\hat{p}_i, A_j] - [\hat{p}_j, A_i] = i\left(\frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_i}\right) = i\,(\boldsymbol{\nabla} \times A)_k = iB_k, \tag{XXII.305}$$

donde los índices i, j, k deben tomarse en orden cíclico y B_k representa la componente k del campo magnético dado por

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \tag{XXII.306}$$

se obtiene

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{\pi}}}{dt} = e\mathbf{E} - e\varepsilon_{ijk}\hat{\mathbf{e}}_i\hat{\alpha}_j B_k = e\mathbf{E} + e\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \mathbf{B}. \tag{XXII.307}$$

El lado derecho de esta ecuación puede considerarse como la forma que la fuerza de Lorentz toma en la teoría de Dirac, con $\mathbf{v}/c \to \hat{\boldsymbol{\alpha}}$, lo que es consistente con la ecuación (XXII.293). En otras palabras, $\hat{\boldsymbol{\pi}}$ satisface una ecuación de evolución que tiene la forma "clásica", en la que el operador $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ juega el papel de la velocidad. Sin embargo, la ecuación (XXII.293) que determina la evolución del operador $\mathbf{x}$, es decir, el análogo de la velocidad, no tiene en forma alguna análogo clásico, ni siquiera dentro de la relatividad especial. Como se ve en la sección 22.3 del texto, esto está directamente relacionado con el fenómeno de zitterbewegung (véase también el problema XXII.17).

XXII.12 Use los resultados del problema anterior para estudiar la ecuación de Dirac para una partícula que se mueve en un campo magnético uniforme y constante aplicado en la dirección Oz. Muestre que existe el fenómeno de zitterbewegung, y que éste conecta estados que difieren en energía por la cantidad $2H \pm eB/H$ en el límite de campo débil ($eB/H^2 \ll eB/m^2 \ll 1$).*Observación*: Es conveniente usar las variables $\hat{\alpha}_\pm = \hat{\alpha}_x \pm i\hat{\alpha}_y$, $\hat{\pi}_\pm = \hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y$, $\hat{\alpha}_z$ y $\hat{\pi}_z$.

La determinación de los valores propios de la energía y de las correspondientes funciones propias de Dirac para este caso se hace con detalle en el problema XXII.17; en el presente problema se analiza solamente el fenómeno de zitterbewegung.

Puesto que el zitterbewegung se da para partícula libre, es de esperarse que aparezca igualmente en presencia de campos externos. Para verificar que éste es el caso con un campo magnético, procederemos de manera análoga a como se hace en la sección 22.3 del texto. Aplicando las ecuaciones (XXII.293), (XXII.296) y (XXII.307) al caso de un campo magnético uniforme y constante orientado en la dirección Oz, las ecuaciones de movimiento resultan (seguimos usando las unidades $\hbar = c = 1$)

$$\frac{dx}{dt} = \hat{\alpha}_x, \quad \frac{dy}{dt} = \hat{\alpha}_y, \quad \frac{dz}{dt} = \hat{\alpha}_z, \tag{XXII.308}$$

$$\frac{d\hat{\pi}_x}{dt} = eB\hat{\alpha}_y, \tag{XXII.309}$$

$$\frac{d\hat{\pi}_y}{dt} = -eB\hat{\alpha}_x, \tag{XXII.310}$$

$$\frac{d\hat{\pi}_z}{dt} = 0, \tag{XXII.311}$$

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{\alpha}}}{dt} = 2i\left(\hat{\boldsymbol{\pi}} - \hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{H}\right). \tag{XXII.312}$$

De (XXII.311) sigue que $\hat{\pi}_z$ es una constante de movimiento; con esta consideración la expresión

$$\frac{d\hat{\alpha}_z}{dt} = 2i\hat{\pi}_z - 2i\hat{\alpha}_z H \tag{XXII.313}$$

puede ser integrada directamente para obtener

$$\hat{\alpha}_z = \frac{\hat{\pi}_z}{H} + \left(\hat{\alpha}_z(0) - \frac{\hat{\pi}_z}{H}\right) e^{-i2Ht}. \tag{XXII.314}$$

Para proseguir, es conveniente definir los operadores

$$\hat{\alpha}_\pm = \hat{\alpha}_x \pm i\hat{\alpha}_y, \tag{XXII.315}$$

$$\hat{\pi}_\pm = \hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y, \tag{XXII.316}$$

cuyas ecuaciones de movimiento siguen de inmediato de (XXII.309), (XXII.310) y (XXII.312):

$$\frac{d\hat{\pi}_\pm}{dt} = \mp ieB\hat{\alpha}_\pm, \tag{XXII.317}$$

$$\frac{d\hat{\alpha}_\pm}{dt} = 2i\hat{\pi}_\pm - 2i\hat{\alpha}_\pm H. \tag{XXII.318}$$

Derivando respecto al tiempo esta última expresión, con H tomada como una constante de movimiento, se tiene

$$\frac{d^2\hat{\alpha}_\pm}{dt^2} = 2i\frac{d\hat{\pi}_\pm}{dt} - 2i\frac{d\hat{\alpha}_\pm}{dt}H. \tag{XXII.319}$$

Sustituyendo (XXII.317) obtenemos la ecuación

$$\frac{d^2\hat{\alpha}_\pm}{dt^2} + 2i\frac{d\hat{\alpha}_\pm}{dt}H \mp 2eB\hat{\alpha}_\pm = 0. \tag{XXII.320}$$

que para $\hat{\alpha}_+$ tiene soluciones de la forma

$$\hat{\alpha}_+ = \hat{A}e^{\gamma t}, \tag{XXII.321}$$

donde el coeficiente γ queda dado por ecuación resolvente

$$\gamma^2 + 2iH\gamma - 2eB = 0, \tag{XXII.322}$$

es decir,

$$\gamma = -iH \pm iH\sqrt{1 - \frac{2eB}{H^2}}. \tag{XXII.323}$$

Para mantener una conveniente claridad en las expresiones que siguen, introducimos la condición inicial $\hat{\alpha}_+(t=0) = \hat{\alpha}_+(0)$. La solución se escribe entonces como

$$\hat{\alpha}_+(t) = \frac{1}{2}\hat{\alpha}_+(0)\left[e^{\left(-iH+iH\sqrt{1-2eB/H^2}\right)t} + e^{\left(-iH-iH\sqrt{1-2eB/H^2}\right)t}\right]. \tag{XXII.324}$$

En el límite de campo débil, cuando

$$\frac{2eB}{H^2} \ll 1, \tag{XXII.325}$$

puede tomarse $\sqrt{1-2eB/H^2} \approx 1 - eB/H^2$. Introduciendo además la frecuencia

$$\omega_c = \frac{eB}{H}, \tag{XXII.326}$$

queda

$$\hat{\alpha}_+(t) = \frac{1}{2}\hat{\alpha}_+(0)\left(e^{-i\omega_c t} + e^{-i(2H-\omega_c)t}\right). \tag{XXII.327}$$

El resultado para $\hat{\alpha}_-(t)$ se obtiene del anterior con la sustitución $B \to -B$, que implica $\omega_c \to -\omega_c$, como puede inferirse de (XXII.320); por lo tanto,

$$\hat{\alpha}_-(t) = \frac{1}{2}\hat{\alpha}_-(0)\left[e^{\left(-iH+iH\sqrt{1+2eB/H^2}\right)t} + e^{\left(-iH-iH\sqrt{1+2eB/H^2}\right)t}\right]. \tag{XXII.328}$$

De nuevo, en el límite de campo débil queda

$$\hat{\alpha}_-(t) = \frac{1}{2}\hat{\alpha}_-(0)\left(e^{i\omega_c t} + e^{-i(2H+\omega_c)t}\right). \tag{XXII.329}$$

Con estos resultados y las definiciones (XXII.315) se obtiene

$$\hat{\alpha}_x(t) = \frac{1}{4}\left[\hat{\alpha}_+(0)\left(e^{-i\omega_c t} + e^{-i(2H-\omega_c)t}\right) + \hat{\alpha}_-(0)\left(e^{i\omega_c t} + e^{-i(2H+\omega_c)t}\right)\right].$$

Insertando aquí los valores iniciales

$$\hat{\alpha}_+(0) = \hat{\alpha}_x(0) + i\hat{\alpha}_y(0), \tag{XXII.330}$$
$$\hat{\alpha}_-(0) = \hat{\alpha}_x(0) - i\hat{\alpha}_y(0), \tag{XXII.331}$$

podemos escribir

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_x(t) &= \frac{1}{4}\left\{\hat{\alpha}_x(0)\left[e^{-i\omega_c t} + e^{-i(2H-\omega_c)t} + e^{i\omega_c t} + e^{-i(2H+\omega_c)t}\right]\right. \\ &\quad \left. + i\hat{\alpha}_y(0)\left[e^{-i\omega_c t} + e^{-i(2H-\omega_c)t} - e^{i\omega_c t} - e^{-i(2H+\omega_c)t}\right]\right\} \\ &= \frac{1}{2}\left\{\hat{\alpha}_x(0)\left(\cos\omega_c t + e^{-i2Ht}\cos\omega_c t\right) + \hat{\alpha}_y(0)\right. \\ &\quad \left.\times\left(\operatorname{sen}\omega_c t - e^{-i2Ht}\operatorname{sen}\omega_c t\right)\right\}, \end{aligned} \tag{XXII.332}$$

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_x(t) &= \frac{1}{2}\left[\hat{\alpha}_x(0)\cos\omega_c t + \hat{\alpha}_y(0)\operatorname{sen}\omega_c t\right] \\ &\quad + \frac{1}{2}\left[\hat{\alpha}_x(0)\cos\omega_c t - \hat{\alpha}_y(0)\operatorname{sen}\omega_c t\right]e^{-i2Ht}. \end{aligned} \tag{XXII.333}$$

Para simplificar esta expresión ponemos

$$\hat{\alpha}_x(0) = \cos\delta, \quad \hat{\alpha}_y(0) = \operatorname{sen}\delta, \tag{XXII.334}$$

con δ una fase real; entonces

$$\hat{\alpha}_x(t) = \frac{1}{2}\cos(\omega_c t - \delta) + \frac{1}{2}\cos(\omega_c t + \delta)\, e^{-i2Ht}, \tag{XXII.335}$$

y de manera análoga,

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_y(t) &= \frac{1}{2}\left[\hat{\alpha}_x(0)\left(-\operatorname{sen}\omega_c t + e^{-i2Ht}\operatorname{sen}\omega_c t\right)\right. \\ &\quad \left. + \hat{\alpha}_y(0)\left(\cos\omega_c t + e^{-i2Ht}\cos\omega_c t\right)\right], \end{aligned} \tag{XXII.336}$$

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_y(t) &= \frac{1}{2}\left[-\hat{\alpha}_x(0)\operatorname{sen}\omega_c t + \hat{\alpha}_y(0)\cos\omega_c t\right] \\ &\quad + \frac{1}{2}\left[\hat{\alpha}_x(0)\operatorname{sen}\omega_c t + \hat{\alpha}_y(0)\cos\omega_c t\right]e^{-i2Ht}, \end{aligned} \tag{XXII.337}$$

o bien, usando (XXII.334),

$$\hat{\alpha}_y(t) = -\frac{1}{2}\operatorname{sen}(\omega_c t - \delta) + \frac{1}{2}\operatorname{sen}(\omega_c t + \delta)\, e^{-i2Ht}. \tag{XXII.338}$$

De (XXII.335) y (XXII.308) se obtiene para la velocidad

$$\frac{dx}{dt} = \hat{\alpha}_x(t) = \frac{1}{2}\cos(\omega_c t - \delta) + \frac{1}{2}\cos(\omega_c t + \delta)\, e^{-i2Ht}, \tag{XXII.339}$$

de donde sigue por integración que

$$x(t) = x(0) + \frac{1}{2\omega_c}\operatorname{sen}(\omega_c t - \delta) + \frac{1}{2}\int_0^t \cos(\omega_c t + \delta)\, e^{-i2Ht}dt, \tag{XXII.340}$$

$$\begin{aligned}x(t) &= x(0) + \frac{1}{2\omega_c}\operatorname{sen}(\omega_c t - \delta) + \frac{i}{4(2H-\omega_c)}e^{i\delta}e^{-i(2H-\omega_c)t} \\ &\quad + \frac{i}{4(2H+\omega_c)}e^{-i\delta}e^{-i(2H+\omega_c)t} - \frac{i}{4(2H-\omega_c)}e^{i\delta} \\ &\quad - \frac{i}{4(2H+\omega_c)}e^{-i\delta}. \end{aligned} \tag{XXII.341}$$

De manera análoga,

$$\frac{dy}{dt} = \hat{\alpha}_y\,(t) = -\frac{1}{2}\,\mathrm{sen}\,(\omega_c t - \delta) + \frac{1}{2}\,\mathrm{sen}\,(\omega_c t + \delta)\,e^{-i2Ht}, \tag{XXII.342}$$

de donde

$$\begin{aligned} y(t) \;\; = \;\; & y(0) + \frac{1}{2\omega_c}\cos(\omega_c t - \delta) + \frac{1}{4(2H-\omega_c)}e^{i\delta}e^{-i(2H-\omega_c)t} \\ & -\frac{1}{4(2H+\omega_c)}e^{-i\delta}e^{-i(2H+\omega_c)t} - \frac{1}{4(2H-\omega_c)}e^{i\delta} + \frac{1}{4(2H+\omega_c)}e^{-i\delta}. \end{aligned} \tag{XXII.343}$$

Por último,

$$\frac{dz}{dt} = \hat{\alpha}_z = \frac{\hat{\pi}_z}{H} + \left(\hat{\alpha}_z\,(0) - \frac{\hat{\pi}_z}{H}\right)e^{-i2Ht}, \tag{XXII.344}$$

de donde

$$z\,(t) = z\,(0) + \frac{\hat{\pi}_z}{H}t + \frac{i}{2H}\left(\hat{\alpha}_z\,(0) - \frac{\hat{\pi}_z}{H}\right)e^{-i2Ht}. \tag{XXII.345}$$

Comparando los resultados anteriores con las correspondientes expresiones relativistas clásicas, que pueden escribirse en la forma[1]

$$x(t) = x(0) + r\,\mathrm{sen}(\omega_c t + \varsigma), \tag{XXII.346}$$

$$y(t) = y(0) + r\cos(\omega_c t + \varsigma), \tag{XXII.347}$$

se observa la aparición en las ecuaciones cuánticas de términos adicionales que describen oscilaciones de muy alta frecuencia alrededor de la trayectoria clásica: éste es el zitterbewegung. Como los términos de zitterbewegung son proporcionales a $e^{-i(2H-\omega_c)t}$ y $e^{-i(2H+\omega_c)t}$, corresponden a oscilaciones de frecuencias $2H \pm \omega_c$, que, en unidades físicas, para $H \approx mc^2$ corresponden a $2mc^2/\hbar \pm \omega_c$ y amplitudes del orden de $1/2H \approx \hbar c/2mc^2 = \hbar/2mc$, es decir, del orden de la longitud de onda de Compton. Es claro que la frecuencia central $2mc^2/\hbar$ tiene su origen en el acoplamiento entre los estados de energía positiva y negativa. Este punto se desarrolla con más amplitud en el problema XXII.17.

XXII.13 Parta de las relaciones

$$\hat{\alpha}_\pm\hat{\alpha}_z = \mp\hat{\sigma}_\pm, \quad \hat{\alpha}_+\hat{\alpha}_- = 2(1+\hat{\sigma}_z),$$

y use los resultados del problema anterior para calcular las soluciones de Dirac para el espín $\hat{\sigma}_i(t)$. En particular, compruebe que en el límite no relativista el promedio temporal sobre el período π/H ($\ll 2\pi H/eB$) da

$$\overline{\sigma_\pm(t)} = \sigma_\pm(0)e^{\mp ieBt/m}, \quad \overline{\sigma_z(t)} \approx \sigma_z(0),$$

resultado que muestra que la frecuencia de precesión del espín es el doble de la clásica debido al valor $g = 2$ para el espín.

[1] Véase por ejemplo L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *The Classical Theory of Fields*, Pergamon (1975), p. 53.

Usando las definiciones (XXII.315) y

$$\hat{\sigma}_+ = \hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y, \quad \hat{\sigma}_- = \hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y, \tag{XXII.348}$$

sigue de inmediato que

$$\hat{\alpha}_\pm \hat{\alpha}_z = \mp\hat{\sigma}_\pm, \quad \hat{\alpha}_+\hat{\alpha}_- = 2\left(1+\hat{\sigma}_z\right). \tag{XXII.349}$$

En el problema anterior se demostró que

$$\hat{\alpha}_+(t) = \frac{1}{2}\hat{\alpha}_+(0)\left(e^{-i\omega_c t} + e^{-i(2H-\omega_c)t}\right), \tag{XXII.350}$$

$$\hat{\alpha}_-(t) = \frac{1}{2}\hat{\alpha}_-(0)\left(e^{i\omega_c t} + e^{-i(2H+\omega_c)t}\right), \tag{XXII.351}$$

$$\hat{\alpha}_z = \frac{\hat{\pi}_z}{H} + \left(\hat{\alpha}_z(0) - \frac{\hat{\pi}_z}{H}\right)e^{-i2Ht}, \tag{XXII.352}$$

lo que, sustituido en las expresiones anteriores, conduce a

$$\hat{\sigma}_+ = -\frac{1}{2}\hat{\alpha}_+(0)\left(e^{-i\omega_c t} + e^{-i(2H-\omega_c)t}\right)\left[\frac{\hat{\pi}_z}{H} + \left(\hat{\alpha}_z(0) - \frac{\hat{\pi}_z}{H}\right)e^{-i2Ht}\right], \tag{XXII.353}$$

$$\hat{\sigma}_- = \frac{1}{2}\hat{\alpha}_-(0)\left(e^{i\omega_c t} + e^{-i(2H+\omega_c)t}\right)\left[\frac{\hat{\pi}_z}{H} + \left(\hat{\alpha}_z(0) - \frac{\hat{\pi}_z}{H}\right)e^{-i2Ht}\right], \tag{XXII.354}$$

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_z &= \frac{1}{8}\hat{\alpha}_+(0)\hat{\alpha}_-(0)\left(e^{-i\omega_c t} + e^{-i(2H-\omega_c)t}\right)\left(e^{i\omega_c t} + e^{-i(2H+\omega_c)t}\right) - \mathbb{I} \\ &= \frac{1}{8}\hat{\alpha}_+(0)\hat{\alpha}_-(0)\left(1 + e^{-i(2H+2\omega_c)t} + e^{-i(2H-2\omega_c)t} + e^{-i4Ht}\right) - \mathbb{I}.\end{aligned} \tag{XXII.355}$$

Ahora escribimos

$$\hat{\sigma}_x = \frac{1}{2}\left(\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-\right) = -\frac{1}{2}\left(\hat{\alpha}_+ - \hat{\alpha}_-\right)\hat{\alpha}_z \tag{XXII.356}$$

y sustituimos (XXII.350) y (XXII.351), para obtener

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_x &= -\frac{1}{4}\left[\hat{\alpha}_+(0)\left(e^{-i\omega_c t} + e^{-i(2H-\omega_c)t}\right) - \hat{\alpha}_-(0)\left(e^{i\omega_c t} + e^{-i(2H+\omega_c)t}\right)\right]\hat{\alpha}_z \\ &= -\frac{1}{4}\left\{\hat{\alpha}_x(0)\left(e^{-i\omega_c t} + e^{-i(2H-\omega_c)t} - e^{i\omega_c t} - e^{-i(2H+\omega_c)t}\right)\right. \\ &\quad \left. + i\hat{\alpha}_y(0)\left(e^{-i\omega_c t} + e^{-i(2H-\omega_c)t} + e^{i\omega_c t} + e^{-i(2H+\omega_c)t}\right)\right\}\hat{\alpha}_z \\ &= -\frac{i}{2}\left\{\hat{\alpha}_x(0)\left(-\operatorname{sen}\omega_c t + \operatorname{sen}\omega_c t e^{-i2Ht}\right)\right. \\ &\quad \left. + \hat{\alpha}_y(0)\left(\cos\omega_c t + \cos\omega_c t e^{-i2Ht}\right)\right\}\hat{\alpha}_z \\ &= \frac{i}{2}\left\{\left(\hat{\alpha}_x(0)\operatorname{sen}\omega_c t - \hat{\alpha}_y(0)\cos\omega_c t\right)\right. \\ &\quad \left. - e^{-i2Ht}\left(\hat{\alpha}_x(0)\operatorname{sen}\omega_c t + \hat{\alpha}_y(0)\cos\omega_c t\right)\right\}\hat{\alpha}_z.\end{aligned} \tag{XXII.357}$$

Tomando como en el problema anterior

$$\hat{\alpha}_x(0) = \cos\delta, \quad \hat{\alpha}_y(0) = \operatorname{sen}\delta, \tag{XXII.358}$$

se obtiene

$$\hat{\sigma}_x = \frac{i}{2}\left[\operatorname{sen}\left(\omega_c t-\delta\right)-\operatorname{sen}\left(\omega_c t+\delta\right)e^{-i2Ht}\right]\left[\frac{\hat{\pi}_z}{H}+\left(\hat{\alpha}_z\left(0\right)-\frac{\hat{\pi}_z}{H}\right)e^{-i2Ht}\right]. \tag{XXII.359}$$

De manera análoga, partiendo de

$$\hat{\sigma}_y = -\frac{1}{2}i\left(\hat{\sigma}_+-\hat{\sigma}_-\right)=\frac{1}{2}i\left(\hat{\alpha}_++\hat{\alpha}_-\right)\hat{\alpha}_z \tag{XXII.360}$$

y sustituyendo las expresiones (XXII.350) y (XXII.351), se obtiene

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_y &= \frac{1}{2}i\big\{\hat{\alpha}_x(0)\big[\cos\omega t+\cos\omega t e^{-i2Ht}\big]+\hat{\alpha}_y(0)\big[\operatorname{sen}\omega t-\operatorname{sen}\omega t e^{-i2Ht}\big]\big\}\hat{\alpha}_z\\ &= -\frac{1}{2i}\left\{\left[\hat{\alpha}_x(0)\cos\omega t+\hat{\alpha}_y(0)\operatorname{sen}\omega t\right]\right.\\ &\quad\left.+\,e^{-i2Ht}\left[\hat{\alpha}_x(0)\cos\omega t-\hat{\alpha}_y(0)\operatorname{sen}\omega t\right]\right\}\hat{\alpha}_z,\end{aligned} \tag{XXII.361}$$

o con (XXII.358),

$$\hat{\sigma}_y = \frac{i}{2}\left[\cos\left(\omega_c t-\delta\right)+\cos\left(\omega_c t+\delta\right)e^{-i2Ht}\right]\left[\frac{\hat{\pi}_z}{H}+\left(\hat{\alpha}_z\left(0\right)-\frac{\hat{\pi}_z}{H}\right)e^{-i2Ht}\right]. \tag{XXII.362}$$

El promedio temporal de (XXII.355), (XXII.353) y (XXII.354) sobre un período asociado a la frecuencia central $T=\pi/H \ll 2\,\pi H/eB = 2\pi/\omega_c = T_c$, da

$$\overline{\sigma_z(t)} = \frac{1}{8}\hat{\alpha}_+(0)\hat{\alpha}_-(0)-\mathbb{I}=\sigma_z(0), \tag{XXII.363}$$

$$\overline{\sigma_+(t)} = -\frac{1}{2}\hat{\alpha}_+(0)e^{-i\omega_c t}\hat{\alpha}_z(0)=\hat{\sigma}_+(0)e^{-i\omega_c t}, \tag{XXII.364}$$

$$\overline{\sigma_-(t)} = \frac{1}{2}\hat{\alpha}_-(0)e^{i\omega_c t}\hat{\alpha}_z(0)=\hat{\sigma}_-(0)e^{i\omega_c t}. \tag{XXII.365}$$

* **XXII.14** Use los resultados del problema XXII.11 para resolver la ecuación de Dirac para una partícula que se mueve en el seno de un campo eléctrico uniforme y constante ($\mathbf{A}=0$, $\mathbf{B}=0$, $\phi=-\mathbf{E}\cdot\mathbf{r}$). Resuelva por aproximaciones sucesivas.

Como $\mathbf{A}$ =0, tomando el campo eléctrico uniforme y constante orientado en la dirección Oz, de la ecuación (XXII.288) sigue que $\hat{\boldsymbol{\pi}}=\hat{\mathbf{p}}$ y $\phi=-\mathcal{E}z$, con lo que las ecuaciones de movimiento (XXII.293), (XXII.307) y (XXII.296) dan, respectivamente,

$$\dot{x}=\hat{\alpha}_x,\quad \dot{y}=\hat{\alpha}_y,\quad \dot{z}=\hat{\alpha}_z; \tag{XXII.366}$$

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt}=0,\quad \frac{d\hat{p}_y}{dt}=0,\quad \frac{d\hat{p}_z}{dt}=e\mathcal{E}; \tag{XXII.367}$$

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{\alpha}}}{dt}=2i\left[\hat{\mathbf{p}}-\hat{\boldsymbol{\alpha}}\left(\hat{H}+e\mathcal{E}z\right)\right], \tag{XXII.368}$$

en el sistema de unidades con $\hbar=c=1$. Integrando (XXII.367) se obtiene

$$\hat{p}_x(t)=\hat{p}_x(0),\quad \hat{p}_y(t)=\hat{p}_y(0), \tag{XXII.369}$$

$$\hat{p}_z(t)=e\mathcal{E}t+\hat{p}_z(0). \tag{XXII.370}$$

Por otro lado, de (XXII.368) se tiene que

$$\frac{d\alpha_z}{dt}=2i\left[\hat{p}_z-\alpha_z\left(\hat{H}+e\mathcal{E}z\right)\right], \tag{XXII.371}$$

expresión que con ayuda de (XXII.366) y (XXII.370) puede reescribirse como

$$\ddot{z} + 2i\dot{z}\hat{H} = 2ie\mathcal{E}t + 2i\hat{p}_z(0) - 2ie\mathcal{E}\dot{z}z. \tag{XXII.372}$$

Éstas dos últimas ecuaciones son no lineales, lo que complica su solución. Sin embargo, considerando que la energía del sistema es también una constante de movimiento, la primera integral de (XXII.372) es inmediata,

$$\dot{z} + 2iz\hat{H} + ie\mathcal{E}z^2 = ie\mathcal{E}t^2 + 2i\hat{p}_z(0)t + c_1, \tag{XXII.373}$$

con c_1 una contante a determinar de las condiciones iniciales. Ésta es una ecuación de Riccati, cuya solución general puede construirse resolviendo una ecuación lineal si se conoce una solución particular. Bajo ciertas condiciones el término no lineal de (XXII.372) o (XXII.373) puede resultar relativamente pequeño; esto ocurre, por ejemplo, cuando $e\left|\mathcal{E}z\right| \ll \left\langle \hat{H} \right\rangle$, o para $\langle \dot{z}z \rangle \ll t$. Cuando así sucede, puede obtenerse una primera aproximación para la función $z(t)$ despreciando este término, de tal manera que la ecuación a resolver se reduce a

$$\dot{z} + 2iz\hat{H} = ie\mathcal{E}t^2 + 2i\hat{p}_z\left(0\right)t + c_1. \tag{XXII.374}$$

Una mejor aproximación (pero que no se determinará aquí) puede obtenerse sustituyendo en el término cuadrático en z en (XXII.373) el valor aproximado $z(t) \approx z(0) + \hat{p}_z(0)t/H$, que corresponde a la solución sin campo externo ni zitterwebegung; es claro que el efecto neto de esta sustitución se reduce a la modificación de los coeficientes del polinomio cuadrático en t que aparece en el lado derecho de la ecuación (XXII.373).

La ecuación (XXII.374) (o la (XXII.373) linearizada como se acaba de explicar) se resuelve fácilmente utilizando el método del factor integrante[2], que en este caso es

$$\mu = \exp\int 2i\hat{H}dt = e^{2iHt}. \tag{XXII.375}$$

La solución general es

$$z\left(t\right) = \mu^{-1}\left[\int_0^t \mu(t')\left(ie\mathcal{E}t'^2 + 2i\hat{p}_z\left(0\right)t' + c_1\right)dt' + c_2\right], \tag{XXII.376}$$

con c_2 otra constante a determinar de las condiciones iniciales. Así pues,

$$z\left(t\right) = e^{-2iHt}\left[ie\mathcal{E}\int_0^t e^{2iHs}s^2\,ds + 2i\hat{p}_z\left(0\right)\int_0^t e^{2iHs}s\,ds + c_1\int_0^t e^{2iHs}ds + c_2\right]. \tag{XXII.377}$$

Efectuando las integrales y reordenando queda

$$z\left(t\right) = \frac{e\mathcal{E}t^2}{2H} + \left(\frac{\hat{p}_z\left(0\right)}{H} + \frac{ie\mathcal{E}}{2H^2}\right)t + z\left(0\right) + c_2\left(e^{-2iHt} - 1\right), \tag{XXII.378}$$

donde hemos sustituido

$$c_1 = \dot{z}\left(0\right) + 2i\hat{H}z\left(0\right). \tag{XXII.379}$$

[2]Puede verse, por ejemplo, S. L. Campbell,*An Introduction to Differential Equations and their Applications*(Wadsworth, Belmont, 1990).

Evaluando en $t = 0$, se obtiene

$$c_2 = \frac{e\mathcal{E}}{4H^3} - \frac{i\hat{p}_z\,(0)}{2H^2} + i\frac{\dot{z}\,(0)}{2H}, \tag{XXII.380}$$

lo que da, finalmente,

$$z\,(t) = z(0) + \frac{1}{H}\left(\hat{p}_z(0) + \frac{ie\mathcal{E}}{2H}\right)t + \frac{e\mathcal{E}t^2}{2H} - \left[\frac{e\mathcal{E}}{4H^3} + \frac{i}{2H}\left(\dot{z}(0) - \frac{\hat{p}_z(0)}{H}\right)\right]\left(1 - e^{-2iHt}\right). \tag{XXII.381}$$

Al igual que en el estudio del movimiento de la partícula en presencia de un campo magnético uniforme, se ha obtenido el resultado clásico (relativista), más una corrección oscilatoria asociada al fenómeno de Zitterbewegung, como era de esperarse. Esto mismo se repetirá en los siguientes resultados.

Por otro lado, si la ecuación

$$\frac{d\alpha_x}{dt} = 2i\left[\hat{p}_x - \alpha_x\left(\hat{H} + e\mathcal{E}z\right)\right], \tag{XXII.382}$$

obtenida de (XXII.368), se lineariza ignorando el término proporcional a z, se obtiene la ecuación diferencial

$$\ddot{x} = 2ip_x\,(0) - 2i\dot{x}\hat{H}, \tag{XXII.383}$$

cuya primera integral da

$$\dot{x} + 2i\hat{H}x = 2ip_x\,(0)\,t. \tag{XXII.384}$$

La solución general de esta ecuación es

$$x\,(t) = x\,(0) + \frac{p_x\,(0)\,t}{H} + \left(\frac{ip_x\,(0)}{2H^2} - x\,(0)\right)\left(1 - e^{-2iHt}\right). \tag{XXII.385}$$

Un resultado similar se obtiene para la componente y.

La siguiente iteración se puede obtener aproximando los términos no lineales con los resultados anteriores y resolviendo el sistema resultante de ecuaciones; las integraciones se pueden realizar explícitamente, pero las expresiones resultantes son complicadas, por lo que no se proseguirá con este cálculo aquí. En vez de ello, y como una ilustración adicional, resolveremos el problema completo, a partir del estudio directo de su ecuación de Dirac.

Para una partícula que se encuentra bajo la acción de un campo electromagnético externo, la ecuación de Dirac, utilizando la regla de acoplamiento minimal, se escribe en la forma

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{ie}{\hbar c}A_\mu\right)\hat{\gamma}_\mu\Psi + \frac{mc}{\hbar}\Psi = 0, \tag{XXII.386}$$

donde A_μ es el cuadrivector del potencial electromagnético, con $A_\mu = (\mathbf{A},\ iA_0)$. En términos del biespinor

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix}, \tag{XXII.387}$$

con Ψ_A y Ψ_B a su vez espinores de dos componentes, y usando la representación de Pauli-Dirac de las matrices de Dirac, esta ecuación toma la forma

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c}A_k\right)\begin{pmatrix} \hat{O} & -i\hat{\sigma}_k \\ i\hat{\sigma}_k & \hat{O} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} + \left(\frac{\partial}{\partial x_4} + \frac{e}{\hbar c}A_0\right)\begin{pmatrix} \mathbb{I} & \hat{0} \\ \hat{0} & -\mathbb{I} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = -\frac{mc}{\hbar}\begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix}. \tag{XXII.388}$$

En el caso presente sólo se tiene un campo eléctrico homogéneo, que corresponde a poner $A_k = 0$, con lo que se obtiene la pareja de ecuaciones espinoriales

$$-i\frac{\partial}{\partial x_k}\hat{\sigma}_k\Psi_B + \left(\frac{\partial}{\partial x_4} + \frac{e}{\hbar c}A_0\right)\Psi_A = -\frac{mc}{\hbar}\Psi_A, \tag{XXII.389}$$

$$i\frac{\partial}{\partial x_k}\hat{\sigma}_k\Psi_A - \left(\frac{\partial}{\partial x_4} + \frac{e}{\hbar c}A_0\right)\Psi_B = -\frac{mc}{\hbar}\Psi_B. \tag{XXII.390}$$

Como el campo eléctrico es constante, la componente A_0 no depende del tiempo, por lo que deben existir soluciones estacionarias de estas ecuaciones de la forma

$$\Psi_A = \psi_A\left(\mathbf{x}\right)e^{-iEt/\hbar}, \quad \Psi_B = \psi_B\left(\mathbf{x}\right)e^{-iEt/\hbar}. \tag{XXII.391}$$

Sustituyendo se obtiene el sistema de ecuaciones

$$-i\hbar c\frac{\partial}{\partial x_k}\hat{\sigma}_k\psi_B + \left(-E + eA_0\right)\psi_A = -mc^2\psi_A, \tag{XXII.392}$$

$$-i\hbar c\frac{\partial}{\partial x_k}\hat{\sigma}_k\psi_A + \left(-E + eA_0\right)\psi_B = mc^2\psi_B, \tag{XXII.393}$$

que de manera más concisa se puede escribir

$$\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_B = \frac{1}{c}\left(E - mc^2 - eA_0\right)\psi_A, \tag{XXII.394}$$

$$\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_A = \frac{1}{c}\left(E + mc^2 - eA_0\right)\psi_B. \tag{XXII.395}$$

Para desacoplar estas ecuaciones despejamos ψ_B de la segunda,

$$\psi_B = \frac{c}{E + mc^2 - eA_0}\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_A \tag{XXII.396}$$

y sustuituimos el resultado en (XXII.394), lo que conduce a una ecuación (exacta) de segundo orden del tipo de la ecuación de van der Waerden para ψ_A:

$$\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\frac{c^2}{E + mc^2 - eA_0}\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_A = \left(E - mc^2 - eA_0\right)\psi_A. \tag{XXII.397}$$

Para encontrar la solución es conveniente utilizar la identidad

$$\frac{1}{A+B} = \frac{1}{A}\left(1 - B\frac{1}{A+B}\right), \tag{XXII.398}$$

que permite proceder por aproximaciones sucesivas, para escribir

$$\begin{aligned}\frac{c}{E + mc^2 - eA_0} &= \frac{c}{E + mc^2}\left(1 + \frac{eA_0}{E + mc^2 - eA_0}\right)\\ &= \frac{c}{E + mc^2} + \frac{ceA_0}{\left(E + mc^2\right)^2}\left(1 + \frac{eA_0}{E + mc^2} + \cdots\right).\end{aligned} \tag{XXII.399}$$

A orden más bajo en el campo externo, la ecuación (XXII.397) se reduce a

$$\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\frac{c^2}{E + mc^2}\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_A = \left(E - mc^2 - eA_0\right)\psi_A, \tag{XXII.400}$$

de donde

$$\left(\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)^2\psi_A=\frac{1}{c^2}\left(E-mc^2-eA_0\right)\left(E+mc^2\right)\psi_A. \tag{XXII.401}$$

Tomamos el campo eléctrico dirigido a lo largo del eje z, o sea $A_0=-\mathcal{E}z$ y usamos la ecuación (XXII.154) (o (T15.10)) para escribir

$$\hat{\mathbf{p}}^2\psi_A-\frac{1}{c^2}\left(E-mc^2+e\mathcal{E}z\right)\left(E+mc^2\right)\psi_A=0. \tag{XXII.402}$$

Del problema XXII.11 sabemos que las componentes del momento a lo largo del eje x y del eje y son cantidades conservadas; de hecho, la ecuación (XXII.402) para estas componentes corresponde a la de partícula libre. Tomando esto en cuenta buscaremos soluciones de la forma

$$\psi_A=\varphi\left(z\right)e^{ip_xx/\hbar}e^{ip_yy/\hbar}, \tag{XXII.403}$$

con lo que la ecuación a resolver se reduce a

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\varphi+\frac{1}{\hbar^2c^2}\left[\left(E^2-m^2c^4-c^2p_x^2-c^2p_y^2\right)+e\mathcal{E}z\left(E+mc^2\right)\right]\varphi=0. \tag{XXII.404}$$

En términos de las cantidades

$$E'=\frac{1}{2mc^2}\left(E^2-m^2c^4-c^2p_x^2-c^2p_y^2\right) \tag{XXII.405}$$

y

$$k=\frac{e\mathcal{E}}{c^2}\left(E+mc^2\right), \tag{XXII.406}$$

la ecuación diferencial se reescribe como

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\varphi+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E'+kz\right)\varphi=0. \tag{XXII.407}$$

Identificamos aquí la ecuación de Schrödinger para una partícula en presencia de un campo homogéneo, que tiene solución única que decrece exponencialmente cuando $z\to-\infty$ y oscila cuando $z\to\infty$, para cualquier valor de E'. En consecuencia, el espectro de energía de una partícula en un campo eléctrico homogéneo es continuo y no degenerado; el movimiento de la partícula está limitado en la dirección de las z negativas, pero es ilimitado en la dirección z positiva. Introduciendo la nueva variable

$$z'=\left(\frac{2mk}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(z+\frac{E'}{k}\right), \tag{XXII.408}$$

la ecuación (XXII.407) toma la forma

$$\frac{\partial^2}{\partial z'^2}\varphi+z'\varphi=0, \tag{XXII.409}$$

cuya solución, finita para cualquier z, tiene la forma

$$\varphi\left(z'\right)=NA\left(-z'\right), \tag{XXII.410}$$

con

$$A\left(z'\right)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\cos\left(\frac{u^3}{z'}+uz'\right)du \tag{XXII.411}$$

la función de Airy y $N = \left(2m\pi^{-3/2}k^{-1/2}\hbar^{-2}\right)^{1/3}$ el factor de normalización. Por lo tanto,

$$\Psi_A = NA\left(-z'\right)e^{ip_x x/\hbar}e^{ip_y y/\hbar}e^{-iEt/\hbar}, \tag{XXII.412}$$

con z' dada por (XXII.408), mientras que la componente Ψ_B está dada por (XXII.391) y (XXII.396).

* **XXII.15** Como la transformación de Foldy y Wouthuysen es independiente de x, se cumple que $p' = p$, pero $x' = e^{i\hat{S}}xe^{-i\hat{S}} \neq x$, $\dot{x}' \neq \dot{x}$, $\hat{L}'_i \neq \hat{L}_i$, etc. (las primas identifican operadores en la representación F-W). Calcule $\mathbf{x}'$, $\dot{\mathbf{x}}'$, $\hat{\mathbf{L}}'$, $\hat{\mathbf{S}}'$.

La transformación de Foldy-Wouthuysen (F-W) se estudia en el problema ilustrativo 22.1 del texto; ahí se demuestra que ésta puede obtenerse realizando una transformación unitaria con el operador

$$\hat{U} = e^{i\hat{S}} = \frac{c\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + mc^2 + E}{\sqrt{2E\left(E+mc^2\right)}}, \tag{XXII.413}$$

donde E representa la energía positiva. La inversa de esta transformación es (véase el ejercicio XXII.25)

$$\hat{U}^{-1} = e^{-i\hat{S}} = \frac{c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\hat{\beta} + mc^2 + E}{\sqrt{2E\left(E+mc^2\right)}}. \tag{XXII.414}$$

Como el operador de posición en la representación de F-W está dado por

$$\hat{\mathbf{x}}' = \hat{U}\hat{\mathbf{x}}\hat{U}^{-1} \tag{XXII.415}$$

y en la representación momental

$$\hat{\mathbf{x}} = i\hbar\boldsymbol{\nabla}_p, \tag{XXII.416}$$

(XXII.415) toma en esta última representación la siguiente forma, que resulta más manejable:

$$\hat{\mathbf{x}}' = i\hbar\hat{U}\boldsymbol{\nabla}_p\hat{U}^{-1}. \tag{XXII.417}$$

Cuando $\mathbf{x}'$ actúa sobre una función ϕ arbitraria se obtiene

$$\hat{\mathbf{x}}'\phi = i\hbar\hat{U}\boldsymbol{\nabla}_p\hat{U}^{-1}\phi = i\hbar\hat{U}\hat{U}^{-1}\boldsymbol{\nabla}_p\phi + i\hbar\hat{U}\left(\boldsymbol{\nabla}_p\hat{U}^{-1}\right)\phi. \tag{XXII.418}$$

Con ayuda de (XXII.416) queda

$$\hat{\mathbf{x}}'\phi = \hat{\mathbf{x}}\phi + i\hbar\hat{U}\left(\boldsymbol{\nabla}_p\hat{U}^{-1}\right)\phi, \tag{XXII.419}$$

y dado que ϕ es arbitraria,

$$\hat{\mathbf{x}}' = \hat{\mathbf{x}} + i\hbar\hat{U}\left(\boldsymbol{\nabla}_p\hat{U}^{-1}\right). \tag{XXII.420}$$

Por otro lado, derivando (XXII.414) se obtiene

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\nabla}_p\hat{U}^{-1} &= \frac{c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\beta} + \boldsymbol{\nabla}_p E}{\left[2E\left(E+mc^2\right)\right]^{1/2}} - \frac{c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\hat{\beta} + mc^2 + E}{\left[2E\left(E+mc^2\right)\right]^{3/2}}\left(2E\boldsymbol{\nabla}_p E + mc^2\boldsymbol{\nabla}_p E\right)\\ &= \frac{c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\beta} + \boldsymbol{\nabla}_p E}{\sqrt{2E\left(E+mc^2\right)}} - \hat{U}^{-1}\frac{\left(2E+mc^2\right)\boldsymbol{\nabla}_p E}{2E\left(E+mc^2\right)}.\end{aligned} \tag{XXII.421}$$

Con esto, (XXII.420) da

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{x}}' &= \hat{\mathbf{x}} + i\hbar\hat{U}\left[\frac{c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\beta}+\boldsymbol{\nabla}_p E}{\sqrt{2E\left(E+mc^2\right)}} - \hat{U}^{-1}\frac{\left(2E+mc^2\right)\boldsymbol{\nabla}_p E}{2E\left(E+mc^2\right)}\right] \\ &= \hat{\mathbf{x}} + i\hbar\left[\frac{\left(c\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}+mc^2+E\right)\left(c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\beta}+\boldsymbol{\nabla}_p E\right)}{2E\left(E+mc^2\right)} - \frac{\left(2E+mc^2\right)\boldsymbol{\nabla}_p E}{2E\left(E+mc^2\right)}\right],\end{aligned} \tag{XXII.422}$$

lo que puede escribirse como

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{x}}' &= \hat{\mathbf{x}} + \frac{i\hbar}{2E\left(E+mc^2\right)}\Big[c^2(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})\hat{\boldsymbol{\alpha}} + c\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})\nabla_p E \\ &\quad + \left(E+mc^2\right)c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\beta} - E\nabla_p E\Big].\end{aligned} \tag{XXII.423}$$

Por otro lado, tenemos

$$(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \hat{\alpha}_i\hat{p}_i\hat{\alpha}_j\hat{\mathbf{e}}_j = \hat{p}_i\hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_j\hat{\mathbf{e}}_j = \hat{p}_i\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j\hat{\mathbf{e}}_j = \hat{p}_i(\delta_{ij}+i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k)\hat{\mathbf{e}}_j = \hat{\mathbf{p}} + i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\times\hat{\mathbf{p}}, \tag{XXII.424}$$

mientras que de $E = \left(\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4\right)^{1/2}$ sigue

$$\boldsymbol{\nabla}_p E = \frac{c^2\mathbf{p}}{E}, \tag{XXII.425}$$

resultados con los que la expresión (XXII.423) se puede reescribir como

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{x}}' &= \hat{\mathbf{x}} + \frac{i\hbar}{2E\left(E+mc^2\right)}\left[c^2\hat{\mathbf{p}} + ic^2\hat{\boldsymbol{\sigma}}\times\hat{\mathbf{p}} + c\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})\frac{c^2\hat{\mathbf{p}}}{E}\right. \\ &\quad \left. + \left(E+mc^2\right)c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\beta} - c^2\hat{\mathbf{p}}\right].\end{aligned} \tag{XXII.426}$$

Simplificando y reordenando, se obtiene para el operador de posición en la representación de F-W

$$\hat{\mathbf{x}}' = \hat{\mathbf{x}} - \frac{c^2\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}\times\hat{\mathbf{p}}}{2E\left(E+mc^2\right)} + \frac{i\hbar c^3\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})\hat{\mathbf{p}}}{2E^2\left(E+mc^2\right)} + \frac{i\hbar c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\beta}}{2E}. \tag{XXII.427}$$

Para calcular la expresión correspondiente al operador de velocidad procedemos como sigue: Reinsertando la c requerida en (XXII.293), se tiene (ecuación (T22.60))

$$\dot{\mathbf{x}} = c\hat{\boldsymbol{\alpha}}; \tag{XXII.428}$$

de aquí que la velocidad en la representación de F-W es

$$\widehat{\dot{\mathbf{x}}}' = c\hat{U}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{U}^{-1} = c\hat{\boldsymbol{\alpha}}'. \tag{XXII.429}$$

Sustituyendo (XXII.413) y (XXII.414) resulta

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{\alpha}}' &= \frac{c\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})+mc^2+E}{2E\left(E+mc^2\right)}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\left[c(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})\hat{\beta}+mc^2+E\right] \\ &= -\frac{c^2(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})\hat{\boldsymbol{\alpha}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})}{2E\left(E+mc^2\right)} + \frac{c\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})\hat{\boldsymbol{\alpha}} + c\hat{\boldsymbol{\alpha}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})\hat{\beta}}{2E} + \frac{\hat{\boldsymbol{\alpha}}\left(mc^2+E\right)}{2E}.\end{aligned} \tag{XXII.430}$$

Con ayuda de la relación de conmutación $\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij}$ y de

$$(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) = \hat{\mathbf{p}}^2, \tag{XXII.431}$$

podemos escribir

$$c^2(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})\hat{\boldsymbol{\alpha}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) = 2c^2\hat{\mathbf{p}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) - c^2\hat{\mathbf{p}}^2\hat{\boldsymbol{\alpha}} \tag{XXII.432}$$

y

$$\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})\hat{\boldsymbol{\alpha}} + \hat{\boldsymbol{\alpha}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})\hat{\beta} = \hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})\hat{\boldsymbol{\alpha}} + 2\hat{\beta}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})\hat{\boldsymbol{\alpha}} = 2\hat{\beta}\hat{\mathbf{p}}, \tag{XXII.433}$$

con lo que la expresión (XXII.430) queda

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}}' = -\frac{c^2\hat{\mathbf{p}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})}{E\left(E + mc^2\right)} + \frac{c^2\hat{\mathbf{p}}^2\hat{\boldsymbol{\alpha}}}{2E\left(E + mc^2\right)} + \frac{c\hat{\beta}\hat{\mathbf{p}}}{E} + \frac{\hat{\boldsymbol{\alpha}}\left(E + mc^2\right)}{2E}. \tag{XXII.434}$$

Usando

$$c^2\mathbf{p}^2 = E^2 - m^2c^4 = \left(E - mc^2\right)\left(E + mc^2\right), \tag{XXII.435}$$

se obtiene

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{\alpha}}' &= -\frac{c^2\hat{\mathbf{p}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})}{E\left(E + mc^2\right)} + \frac{\hat{\boldsymbol{\alpha}}\left(E - mc^2\right)}{2E} + \frac{c\hat{\beta}\hat{\mathbf{p}}}{E} + \frac{\hat{\boldsymbol{\alpha}}\left(E + mc^2\right)}{2E} \\ &= -\frac{c^2\hat{\mathbf{p}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})}{E\left(E + mc^2\right)} + \hat{\boldsymbol{\alpha}} + \frac{c\hat{\beta}\hat{\mathbf{p}}}{E}.\end{aligned} \tag{XXII.436}$$

De esta manera concluimos que el operador de velocidad en la representación F-W es

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}}' = c\hat{\boldsymbol{\alpha}}' = c\hat{\boldsymbol{\alpha}} - \frac{c^3\hat{\mathbf{p}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})}{E\left(E + mc^2\right)} + \frac{c^2\hat{\beta}\hat{\mathbf{p}}}{E}. \tag{XXII.437}$$

El cálculo del operador de momento angular orbital en la representación F-W se simplifica debido a que el momento es el mismo en las dos representaciones,

$$\hat{\mathbf{p}}' = \hat{\mathbf{p}}. \tag{XXII.438}$$

De aquí sigue que

$$\hat{L}_i' = \hat{U}\hat{L}_i\hat{U}^{-1} = \varepsilon_{ijk}\hat{U}x_j\hat{p}_k\hat{U}^{-1} = \varepsilon_{ijk}\hat{U}x_j\hat{U}^{-1}\hat{U}\hat{p}_k\hat{U}^{-1} = \varepsilon_{ijk}x_j'\hat{p}_k' = \varepsilon_{ijk}x_j'\hat{p}_k, \tag{XXII.439}$$

o sea,

$$\hat{\mathbf{L}}' = \hat{\mathbf{x}}' \times \hat{\mathbf{p}}' = \hat{\mathbf{x}}' \times \hat{\mathbf{p}}. \tag{XXII.440}$$

Sustituyendo la expresión (XXII.427) se obtiene

$$\hat{\mathbf{L}}' = \left[\hat{\mathbf{x}} - \frac{c^2\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \hat{\mathbf{p}}}{2E\left(E + mc^2\right)} + \frac{i\hbar c^3\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}})\hat{\mathbf{p}}}{2E^2\left(E + mc^2\right)} + \frac{i\hbar c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\beta}}{2E}\right] \times \hat{\mathbf{p}}, \tag{XXII.441}$$

de donde resulta que

$$\hat{\mathbf{L}}' = \hat{\mathbf{L}} - \frac{c^2\hbar(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \hat{\mathbf{p}}) \times \hat{\mathbf{p}}}{2E\left(E + mc^2\right)} - \frac{i\hbar c\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}}}{2E}. \tag{XXII.442}$$

Para derivar la expresión del operador de espín en la representación F-W es muy útil la fórmula

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{2i}\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\boldsymbol{\alpha}}, \tag{XXII.443}$$

que se demuestra como sigue:

$$\begin{aligned} [\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\boldsymbol{\alpha}}]_i &= \varepsilon_{ijk}\hat{\alpha}_j\hat{\alpha}_k = \varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_k = \varepsilon_{ijk}\left(\delta_{jk} + i\varepsilon_{jkl}\hat{\sigma}_l\right) \\ &= i\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ljk}\hat{\sigma}_l = 2i\delta_{il}\hat{\sigma}_l = 2i\hat{\sigma}_i. \end{aligned}$$

Con ayuda de esta expresión escribimos

$$\hat{\mathbf{S}}' = \frac{\hbar}{2}\hat{U}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{U}^{-1} = \frac{\hbar}{4i}\hat{U}\left(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\boldsymbol{\alpha}}\right)\hat{U}^{-1}. \tag{XXII.444}$$

Como

$$\begin{aligned} \hat{S}'_i &= \frac{\hbar}{4i}\varepsilon_{ijk}\hat{U}\hat{\alpha}_j\hat{\alpha}_k\hat{U}^{-1} = \frac{\hbar}{4i}\varepsilon_{ijk}\hat{U}\hat{\alpha}_j\hat{U}^{-1}\hat{U}\hat{\alpha}_k\hat{U}^{-1} \\ &= \frac{\hbar}{4i}\varepsilon_{ijk}\hat{\alpha}'_j\hat{\alpha}'_k, \end{aligned} \tag{XXII.445}$$

se tiene que

$$\hat{\mathbf{S}}' = \frac{\hbar}{4i}\hat{\boldsymbol{\alpha}}' \times \hat{\boldsymbol{\alpha}}', \tag{XXII.446}$$

o explícitamente, usando (XXII.436),

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}' &= \frac{\hbar}{4i}\left[\hat{\boldsymbol{\alpha}} - \frac{c^2\hat{\mathbf{p}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})}{E\left(E+mc^2\right)} + \frac{c\hat{\beta}\hat{\mathbf{p}}}{E}\right] \times \left[\hat{\boldsymbol{\alpha}} - \frac{c^2\hat{\mathbf{p}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})}{E\left(E+mc^2\right)} + \frac{c\hat{\beta}\hat{\mathbf{p}}}{E}\right] \\ &= \frac{\hbar}{4i}\left[\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\boldsymbol{\alpha}} - \frac{c^2(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}})(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})}{E\left(E+mc^2\right)} + \frac{c(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}})\hat{\beta}}{E}\right. \\ &\quad \left. - \frac{c^2\hat{\mathbf{p}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}) \times \hat{\boldsymbol{\alpha}}}{E\left(E+mc^2\right)} + \frac{c\hat{\beta}(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\boldsymbol{\alpha}})}{E}\right]. \end{aligned} \tag{XXII.447}$$

Para simplificar usamos las siguientes relaciones:

$$(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}})\hat{\beta} = -\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}}) = \hat{\beta}(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\boldsymbol{\alpha}}), \tag{XXII.448}$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}) \times \hat{\boldsymbol{\alpha}} &= \varepsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{\alpha}_l\hat{p}_l\hat{\alpha}_k\hat{\mathbf{e}}_i = \varepsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{\alpha}_l\hat{\alpha}_k\hat{p}_l\hat{\mathbf{e}}_i \\ &= \varepsilon_{ijk}\hat{p}_j\left(2\delta_{lk} - \hat{\alpha}_k\hat{\alpha}_l\right)\hat{p}_l\hat{\mathbf{e}}_i \\ &= -\varepsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{\alpha}_k\hat{\alpha}_l\hat{p}_l\hat{\mathbf{e}}_i = \varepsilon_{ikj}\hat{\mathbf{e}}_i\hat{\alpha}_k\hat{p}_j\hat{\alpha}_l\hat{p}_l = (\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}})(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}). \end{aligned} \tag{XXII.449}$$

Con su ayuda (XXII.447) se reduce a

$$\hat{\mathbf{S}}' = \hat{\mathbf{S}} - \frac{\hbar}{4i}\left[\frac{2c^2(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}})(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}})}{E\left(E+mc^2\right)} + \frac{2c\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}})}{E}\right]. \tag{XXII.450}$$

Una simplificación adicional se obtiene observando que

$$\begin{aligned} (\hat{\boldsymbol{\alpha}} \times \hat{\mathbf{p}})(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}) &= \varepsilon_{ijk}\hat{\alpha}_j\hat{p}_k\hat{\alpha}_l\hat{p}_l\hat{\mathbf{e}}_i = \varepsilon_{ijk}\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_j\hat{p}_k\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_l\hat{p}_l\hat{\mathbf{e}}_i \\ &= \varepsilon_{ijk}\hat{p}_k\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_l\hat{p}_l\hat{\mathbf{e}}_i = \varepsilon_{ijk}\hat{p}_k\left(\delta_{jl} + i\varepsilon_{jlm}\hat{\sigma}_m\right)\hat{p}_l\hat{\mathbf{e}}_i \\ &= -i\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k\varepsilon_{jml}\hat{\sigma}_m\hat{p}_l\hat{\mathbf{e}}_i \\ &= i\varepsilon_{ikj}\hat{p}_k\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \hat{\mathbf{p}}\right)_j\hat{\mathbf{e}}_i = i\hat{\mathbf{p}} \times (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \hat{\mathbf{p}}); \end{aligned} \tag{XXII.451}$$

finalmente, insertando esta relación en el resultado anterior se obtiene

$$\hat{\mathbf{S}}' = \hat{\mathbf{S}} - \frac{\hbar c}{2E}\left[\frac{c\hat{\mathbf{p}}\times(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\times\hat{\mathbf{p}})}{E+mc^2} - i\hat{\beta}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\times\hat{\mathbf{p}})\right]. \tag{XXII.452}$$

XXII.2. Problemas adicionales

XXII.16 Considere la transformación $\varphi \to \varphi^*$ para hacer ver que la ecuación de Klein-Gordon debe describir por igual partículas con carga positiva o negativa, y que no puede describir partículas cuyo número se conserva, como ocurre con los fermiones.

La ecuación de Klein-Gordon es invariante ante la transformación $\varphi \to \varphi^*$, pues ésta equivale a una mera redefinición de la función de onda; como esta conjugación es equivalente a la sustitución $p_\mu \to -p_\mu$, la ecuación debe ser invariante frente a esta última transformación. Pero cambiar el signo de p_μ equivale a cambiar el signo de la carga cuando se considera acoplamiento minimal. Luego ambas cargas están igualmente contenidas en la ecuación de Klein-Gordon, y la carga puede cambiar durante la evolución. Esto significa que, en efecto, la ecuación no puede describir partículas cuyo número se conserva.

La observación anterior fue utilizada por Dirac como uno de los argumentos que lo condujeron a reconocer la necesidad de una ecuación relativista de primer orden para la descripción de los electrones.

XXII.17 Determine las funciones propias de la ecuación de Dirac y los correspondientes valores propios para un electrón que se mueve en el seno de un campo magnético constante y uniforme.

La ecuación de Dirac para una partícula en presencia de un campo electromagnético se puede escribir en la forma

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{ie}{\hbar c}A_\mu\right)\hat{\gamma}_\mu\Psi + \frac{mc}{\hbar}\Psi = 0, \tag{XXII.453}$$

donde A_μ es el cuadrivector del potencial electromagnético, con $A_\mu = (\mathbf{A},\ iA_0)$. Si la solución de esta ecuación se escribe como el biespinor

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix}, \tag{XXII.454}$$

con Ψ_A y Ψ_B a su vez espinores de dos componentes, se separa la derivada temporal de las espaciales y se usa la representación de Pauli-Dirac de las matrices de Dirac, la ecuación (XXII.453) toma la forma

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c}A_k\right)\begin{pmatrix} \hat{0} & -i\hat{\sigma}_k \\ i\hat{\sigma}_k & \hat{0} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix}$$
$$+\left(\frac{\partial}{\partial x_4} + \frac{e}{\hbar c}A_0\right)\begin{pmatrix} \mathbb{I} & \hat{0} \\ \hat{0} & -\mathbb{I} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = -\frac{mc}{\hbar}\begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix}. \tag{XXII.455}$$

En el presente caso $A_0 = 0$, y se obtiene la pareja de ecuaciones espinoriales

$$-i\left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c}A_k\right)\hat{\sigma}_k\Psi_B + \frac{\partial}{\partial x_4}\Psi_A = -\frac{mc}{\hbar}\Psi_A, \tag{XXII.456}$$

$$i\left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c}A_k\right)\hat{\sigma}_k\Psi_A - \frac{\partial}{\partial x_4}\Psi_B = -\frac{mc}{\hbar}\Psi_B. \tag{XXII.457}$$

Como el campo magnético es constante, las componentes A_k del potencial vectorial no dependen del tiempo, por lo que deben existir soluciones estacionarias de estas ecuaciones de la forma

$$\Psi_A = \psi_A(\mathbf{x})e^{-iEt/\hbar}, \tag{XXII.458}$$
$$\Psi_B = \psi_B(\mathbf{x})e^{-iEt/\hbar}. \tag{XXII.459}$$

Sustituyendo se obtiene

$$-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c}A_k\right)\hat{\sigma}_k\psi_B - \frac{E}{c}\psi_A = -mc\psi_A, \tag{XXII.460}$$
$$i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c}A_k\right)\hat{\sigma}_k\psi_A + \frac{E}{c}\psi_B = -mc\psi_B. \tag{XXII.461}$$

De manera más concisa, esto se escribe como

$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_B = \frac{1}{c}\left(E - mc^2\right)\psi_A, \tag{XXII.462}$$
$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_A = \frac{1}{c}\left(E + mc^2\right)\psi_B. \tag{XXII.463}$$

Es posible resolver esta pareja de ecuaciones acopladas de manera exacta; sin embargo, resulta más cómodo desacoplar las ecuaciones y resolver por separado. Efectuamos la separación despejando ψ_B de (XXII.463),

$$\psi_B = \frac{c}{E + mc^2}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_A \tag{XXII.464}$$

y sustituyendo el resultado en (XXII.462), para obtener una ecuación espinorial para ψ_A :

$$\frac{c}{E + mc^2}\left[\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right]\left[\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right]\psi_A = \frac{1}{c}\left(E - mc^2\right)\psi_A. \tag{XXII.465}$$

Con la ayuda de (XXII.154) se puede escribir

$$\begin{aligned}\left[\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right]\left[\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right] &= \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\left[\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\times\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right] \\ &= \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e\hbar}{c}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{B},\end{aligned} \tag{XXII.466}$$

donde se tomó en cuenta que $\hat{\mathbf{p}}\times\mathbf{A} + \mathbf{A}\times\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\left(\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}\right) = -i\hbar\mathbf{B}$. Se obtiene así

$$\left[\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e\hbar}{c}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{B}\right]\psi_A = \left(\frac{E^2}{c^2} - m^2c^2\right)\psi_A. \tag{XXII.467}$$

El vector $\mathbf{A}$ debe satisfacer la pareja de condiciones $\nabla\cdot\mathbf{A} = 0$, $\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A} = \mathbf{B}$, pero por lo demás se le puede escoger libremente. Tomando el eje Oz sobre la dirección del campo externo, de tal manera que $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$, podemos escribir, en particular,

$$A_1 = -By; \quad A_2 = A_3 = A_0 = 0. \tag{XXII.468}$$

Otra selección útil y frecuente es $A_1 = -\frac{1}{2}By$, $A_2 = \frac{1}{2}Bx$, que tiene el atractivo de ser más simétrica, lo que en ciertas aplicaciones puede ser conveniente. Usando (XXII.468), la ecuación (XXII.467) se reduce a

$$\left[\hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{e^2B^2}{c^2}y^2 - \frac{2eB}{c}\left(\frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_z - \hat{p}_x y\right)\right]\psi_A = \left(\frac{E^2}{c^2} - m^2c^2\right)\psi_A. \tag{XXII.469}$$

Antes de seguir adelante con la solución, notamos que es posible darle una forma interesante a esta ecuación. Dividiendo entre $2m$ se obtiene

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}+\frac{e^2B^2}{2mc^2}y^2-\frac{eB}{mc}\left(\frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_z-\hat{p}_xy\right)\right]\psi_A=\frac{1}{2mc^2}\left(E^2-m^2c^4\right)\psi_A. \tag{XXII.470}$$

Si denotamos con $\mathcal{E}$ la energía del electrón en exceso (o defecto) respecto a su masa propia, de tal manera que $E=mc^2+\mathcal{E}$ y

$$\frac{1}{2mc^2}\left(E^2-m^2c^4\right)=\frac{1}{2mc^2}\left(2mc^2+\mathcal{E}\right)\mathcal{E}=\left(1+\frac{\mathcal{E}}{2mc^2}\right)\mathcal{E}, \tag{XXII.471}$$

podemos escribir (XXII.470) como la ecuación de eigenvalores

$$\hat{H}_{\text{ef}}\psi_A=\left(1+\frac{\mathcal{E}}{2mc^2}\right)\mathcal{E}\psi_A, \tag{XXII.472}$$

donde

$$\hat{H}_{\text{ef}}=\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}+\frac{e^2B^2}{2mc^2}y^2-\frac{eB}{mc}\left(\frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_z-\hat{p}_xy\right). \tag{XXII.473}$$

Aunque $\hat{H}_{\text{ef}}$ tiene las dimensiones y muchas propiedades de un hamiltoniano, no lo es, pues sus valores propios están dados por la expresión (XXII.471). Sin embargo, en el límite no relativista cuando $\mathcal{E}\ll mc^2$, los eigenvalores de $\hat{H}_{\text{ef}}$ se reducen sustancialmente a la cantidad $\mathcal{E}$, que es efectivamente una energía, aunque incluye las correcciones relativistas. Debido a esto, es necesario efectuar la aproximación no relativista con cuidado, lo que se hace fácilmente resolviendo la ecuación $\left(1+\mathcal{E}/2mc^2\right)\mathcal{E}=E_n$, donde E_n es el valor propio de $\hat{H}_{\text{ef}}$. Este procedimiento conduce naturalmente a la aparición de soluciones tanto con energía positiva como negativa. Por otra parte, hay dos soluciones independientes para cada una de las energías así obtenidas, asociadas al hecho de que ψ_A es un espinor de dos componentes. En efecto, escribiendo

$$\psi_A=\begin{pmatrix}\varphi_+\\ \varphi_-\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}\varphi_++\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}\varphi_-=\varphi_+\left|+\right\rangle+\varphi_-\left|-\right\rangle, \tag{XXII.474}$$

se tiene

$$\hat{\sigma}_z\psi_A=\varphi_+\left|+\right\rangle-\varphi_-\left|-\right\rangle, \tag{XXII.475}$$

por lo que si representamos con $\sigma\equiv\sigma_\pm=2s_3=\pm1$ los valores propios de $\hat{\sigma}_z$ que corresponden a las componentes $\varphi_\pm$, respectivamente, $\hat{H}_{\text{ef}}$ se puede sustituir, cuando actúa sobre el espinor (XXII.474), por

$$\hat{H}_{\text{ef}}=\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}+\frac{e^2B^2}{2mc^2}y^2-\frac{eB}{mc}\left(\frac{1}{2}\hbar\sigma-\hat{p}_xy\right), \tag{XXII.476}$$

y se obtienen las dos ecuaciones relativistas de Schrödinger

$$\hat{H}_{\text{ef}}\varphi_\pm=\left(1+\frac{\mathcal{E}}{2mc^2}\right)\mathcal{E}\varphi_\pm. \tag{XXII.477}$$

Regresando a la ecuación (XXII.469), introducimos la representación de (XXII.474) para escribirla en la forma

$$\left[\hat{\mathbf{p}}^2+\frac{e^2B^2}{c^2}y^2-\frac{2eB}{c}\left(\frac{1}{2}\hbar\sigma_\pm-\hat{p}_xy\right)\right]\varphi_\pm=\left(\frac{E^2}{c^2}-m^2c^2\right)\varphi_\pm. \tag{XXII.478}$$

Como el operador que actúa sobre las $\varphi_\pm$ no depende explícitamente de las coordenadas x y z (de hecho, respecto de las variables x y z, esta ecuación describe partículas libres), podemos buscar soluciones de la forma

$$\varphi_\pm = Y_\pm(y) e^{ip_x x/\hbar} e^{ip_z z/\hbar}, \tag{XXII.479}$$

donde p_x y p_z son constantes de movimiento. (En lo sucesivo omitiremos el signo $\pm$, que deberá sobreentenderse). Sustituyendo se obtiene

$$\left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{e^2B^2}{c^2} y^2 - \frac{2eB}{c}\left(\frac{1}{2}\hbar\sigma_\pm - \hat{p}_x y\right) + p_x^2 + p_z^2\right] Y(y) = \left(\frac{E^2}{c^2} - m^2c^2\right) Y(y). \tag{XXII.480}$$

Simplificando,

$$\left[-\hbar^2 c^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + (eBy + cp_x)^2 - e\hbar cB\sigma\right] Y(y) = \left(E^2 - m^2c^4 - c^2p_z^2\right) Y(y). \tag{XXII.481}$$

Con el cambio de variable

$$\eta = \sqrt{\frac{eB}{\hbar c}}\left(y + \frac{cp_x}{eB}\right), \tag{XXII.482}$$

y

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sqrt{\frac{eB}{\hbar c}}\frac{\partial}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{eB}{\hbar c}\frac{\partial^2}{\partial \eta^2}, \tag{XXII.483}$$

la ecuación (XXII.481) se simplifica en

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \eta^2\right) Y(\eta) = \frac{E^2 - m^2c^4 - c^2p_z^2 + e\hbar cB\sigma}{e\hbar cB} Y(\eta). \tag{XXII.484}$$

Esta ecuación tiene la forma de la ecuación de Schrödinger para un oscilador armónico unidimensional en las unidades $\hbar = 2m = 1$ y con frecuencia $\omega = 2$. Los eigenvalores de esta ecuación corresponden a los valores propios de la cantidad

$$E' = \frac{E^2 - m^2c^4 - c^2p_z^2 + e\hbar cB\sigma}{e\hbar cB}. \tag{XXII.485}$$

La ecuación de valores propios

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - \eta^2\right) Y = E' Y \tag{XXII.486}$$

se escribe en unidades físicas como la ecuación de Schrödinger unidimensional

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 + \frac{2m}{\hbar^2}E'\right) Y = 0, \tag{XXII.487}$$

cuyas soluciones son

$$Y_n = N H_n(\eta) e^{-\eta^2/2}, \quad \eta = m\omega x/\hbar, \tag{XXII.488}$$

$$E'_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{XXII.489}$$

Combinando (XXII.485), (XXII.487) y (XXII.489) obtenemos, poniendo $2m = 1$, $\omega = 2$,

$$\frac{2m}{\hbar^2}\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{2n+1}{\hbar} = \frac{E^2 - m^2c^4 - c^2p_z^2 + e\hbar cB\sigma}{e\hbar cB}, \qquad \text{(XXII.490)}$$

de donde sigue que las energías accesibles al sistema están dadas por

$$E^2 = m^2c^4 + c^2p_z^2 + e\hbar cB\,(2n+1-\sigma)\,. \qquad \text{(XXII.491)}$$

Para el caso $s_3 = {}^1\!/_2$ ($\sigma = 1$), los eigenvalores de la energía resultan (tomamos las soluciones positivas)

$$E_{n^+} = \sqrt{m^2c^4 + c^2p_z^2 + 2e\hbar cBn} = mc^2\sqrt{1 + \frac{p_z^2}{m^2c^2} - \frac{4\mu_0 B}{mc^2}n}, \qquad \text{(XXII.492)}$$

donde μ_0 es el magnetón de Bohr. Para $s_3 = -{}^1\!/_2$ ($\sigma = -1$) se obtiene

$$E_{n^-} = \sqrt{m^2c^4 + c^2\hat{p}_z^2 + 2e\hbar cB\,(n+1)} = mc^2\sqrt{1 + \frac{p_z^2}{m^2c^2} - \frac{4\mu_0 B}{mc^2}(n+1)}. \qquad \text{(XXII.493)}$$

Desarrollando los radicales a primer orden, queda

$$E_{n^\pm} = mc^2 + \frac{p_z^2}{2m} - \mu_0 B(2n+1) + \mu_0 B\sigma_\pm. \qquad \text{(XXII.494)}$$

En esta expresión se pueden identificar claramente las contribuciones debidas al acoplamiento del momento angular orbital y espinorial con el campo magnético externo.

La función de onda pequeña se obtiene del espinor ψ_A aplicando la ecuación (XXII.464)

$$\begin{aligned}
\psi_B &= \frac{c}{E+mc^2}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_A \\
&= \frac{c}{E+mc^2}\left[(\hat{p}_x + \frac{eB}{c}y)\hat{\sigma}_1 + \hat{p}_y\hat{\sigma}_2 + \hat{p}_z\hat{\sigma}_3\right]\psi_A \\
&= \frac{c}{E+mc^2}\left[\sqrt{\frac{e\hbar B}{c}}(\hat{\sigma}_1\eta - i\hat{\sigma}_2\frac{\partial}{\partial\eta}) + p_z\hat{\sigma}_3\right]\psi_A. \qquad \text{(XXII.495)}
\end{aligned}$$

El valor alto del denominador (pues $E + mc^2 \sim 2mc^2$) garantiza que se trata de una corrección relativista, por lo que normalmente es pequeña.

Por su carácter ilustrativo, se presenta a continuación un método alternativo para determinar los eigenvalores de la energía. En lugar del hamiltoniano de Dirac $\hat{H} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\boldsymbol{\pi}} + \hat{\beta}m$, consideramos el operador (véase el ejercicio XXII.26)

$$\hat{H}^2 = \hat{\pi}^2 + m^2\mathbb{I} + eB\hat{\sigma}_z. \qquad \text{(XXII.496)}$$

Si trabajamos en la representación en la que $\hat{\pi}_z$ y $\hat{\sigma}_z$ son simultáneamente diagonales con eigenvalores p y $s = \pm 1$, respectivamente, podemos escribir

$$\begin{aligned}
\hat{H}^2 &= 2m\hat{H}_t + p^2 + m^2 + eBs, \qquad \text{(XXII.497)} \\
\hat{H}_t &= \frac{1}{2m}\left(\hat{\pi}_x^2 + \hat{\pi}_y^2\right). \qquad \text{(XXII.498)}
\end{aligned}$$

Esta última ecuación, junto con la relación de conmutación

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} \times \hat{\boldsymbol{\pi}} = -ie\mathbf{B}, \tag{XXII.499}$$

define un problema de eigenvalores similar al del oscilador armónico unidimensional, así que los eigenvalores de $\hat{H}_t$ son

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right), \tag{XXII.500}$$

con ω_c igual a la frecuencia de ciclotrón

$$\omega_c = \frac{eB}{m} \tag{XXII.501}$$

y n un número entero positivo. De aquí sigue que los eigenvalores de la energía están dados por la expresión

$$E_n = \pm \left[p^2 + m^2 + eB(2n + s + 1)\right]^{1/2}. \tag{XXII.502}$$

XXII.18 Considere soluciones de la ecuación de Dirac con energía positiva o negativa; a estas funciones las llamaremos*funciones positivas* y*negativas*, respectivamente. Un operador es llamado*operador par* si transforma una función positiva en otra función positiva, o una negativa en otra negativa. Un operador es *impar* si su acción transforma una función positiva en negativa o viceversa. Suponiendo que cada operador de la teoría de Dirac es la suma de una parte par y una impar, encuentre una forma general para separarlas. Muestre, en particular, que el hamiltoniano de Dirac de partícula libre y el operador de momento son pares, mientras que el operador de velocidad es impar.

De su definición es claro que el producto de dos operadores pares o dos impares es siempre un operador par, y que el producto de un operador par por uno impar es impar. También es claro que todas las funciones positivas son ortogonales a todas las funciones negativas. De aquí sigue que el valor esperado de cualquier operador impar sobre funciones con un signo bien definido de la energía es siempre nulo. En un tratamiento cuántico consistente pero en primera cuantización,[3] se utilizan sólo estados con energía positiva o con energía negativa, pero no se les mezcla, pues ello daría lugar a soluciones inestables. Debido a esto, en una teoría consistente en primera cuantización todas las variables físicas deben poder ser expresadas en términos de operadores pares. Es por esta razón que, con frecuencia, los operadores pares son llamados*operadores de una partícula*.

Consideremos un operador arbitrario $\hat{A}$; proponemos que todo operador puede ser descompuesto en una parte par y una impar, que denotaremos $\hat{A}_+$, $\hat{A}_-$, respectivamente (existen diferentes notaciones; por ejemplo, otra usual es $\hat{A}_+ = [\hat{A}]$, $\hat{A}_- = \{\hat{A}\}$). Escribimos, por lo tanto,

$$\hat{A} = \hat{A}_+ + \hat{A}_-. \tag{XXII.503}$$

[3]Esto es lo que se conoce usualmente como *teoría de una partícula*, para distinguirla del caso en que se requiere segunda cuantización, que implica fenómenos de creación y aniquilación de partículas. Una teoría relativista consistente no puede limitarse al caso de una sola partícula, pues en este tipo de teorías las propias interacciones dan lugar a fenómenos de creación y aniquilación de partículas. Como estos fenómenos usualmente dejan de ser significativos a bajas energías y campos débiles, las teorías (relativistas o no) de una partícula deben considerarse como aproximaciones a los procesos reales.

Sea $\hat{\Lambda}$ el operador de signo (véase el ejercicio XXII.27), cuyos eigenestados son las funciones con energía de signo definido, de tal forma que

$$\hat{\Lambda}\Psi_\varepsilon = \varepsilon\Psi_\varepsilon, \tag{XXII.504}$$

donde $\varepsilon = +1$ para funciones positivas y $\varepsilon = -1$ para funciones negativas. Con esto podemos escribir

$$\hat{A}\Psi_+ = \hat{A}_+\Psi_+ + \hat{A}_-\Psi_+, \tag{XXII.505}$$
$$\hat{A}\Psi_- = \hat{A}_+\Psi_- + \hat{A}_-\Psi_-, \tag{XXII.506}$$
$$\hat{\Lambda}\hat{A}\hat{\Lambda}\Psi_+ = \hat{\Lambda}\hat{A}\Psi_+ = \hat{A}_+\Psi_+ - \hat{A}_-\Psi_+, \tag{XXII.507}$$
$$\hat{\Lambda}\hat{A}\hat{\Lambda}\Psi_- = -\hat{\Lambda}\hat{A}\Psi_- = \hat{A}_+\Psi_- - \hat{A}_-\Psi_-. \tag{XXII.508}$$

Combinando por un lado la primera y tercera de estas ecuaciones, y por el otro, la segunda con la cuarta, se obtiene

$$\hat{A}_+ = \frac{1}{2}(\hat{A} + \hat{\Lambda}\hat{A}\hat{\Lambda}), \tag{XXII.509}$$

$$\hat{A}_- = \frac{1}{2}(\hat{A} - \hat{\Lambda}\hat{A}\hat{\Lambda}). \tag{XXII.510}$$

Aplicaremos estos resultados a algunos operadores simples, pero importantes. Para partícula libre el operador de signo $\hat{\Lambda}$ puede definirse como

$$\hat{\Lambda} = \frac{\hat{H}_D}{E_+} = \frac{c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\mathbf{p} + \hat{\beta}mc^2}{E_+}, \quad E_+ = +c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2}. \tag{XXII.511}$$

Para el hamiltoniano de Dirac de partícula libre es inmediato que $\hat{\Lambda}\hat{H}_D\hat{\Lambda} = \hat{H}_D$, de donde sigue

$$\hat{H}_{D+} = \hat{H}_D, \quad \hat{H}_{D-} = 0. \tag{XXII.512}$$

Esto muestra que el hamiltoniano de Dirac es un operador par. Como es igualmente inmediato que $\hat{\Lambda}\hat{\mathbf{p}}\hat{\Lambda} = \hat{\mathbf{p}}$, por lo que también el operador $\hat{\mathbf{p}}$ es par.

Consideremos ahora el operador de velocidad, que está dado por $\dot{\mathbf{x}} = c\hat{\boldsymbol{\alpha}}$. Tenemos

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}}_+ = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{\alpha}} + \hat{\Lambda}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\Lambda}) = \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\alpha}} + \frac{c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\beta}mc^2}{2E_+}\hat{\boldsymbol{\alpha}}\frac{c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\beta}mc^2}{E_+}. \tag{XXII.513}$$

Para reducir esta expresión desarrollamos el numerador y utilizamos (XXII.432) y (XXII.433):

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{\alpha}}_+ &= \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\alpha}} + \frac{1}{2E_+^2}\left[2c^2\hat{\mathbf{p}}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\mathbf{p}}) - c^2\hat{\mathbf{p}}^2\hat{\boldsymbol{\alpha}} + 2mc^3\hat{\mathbf{p}}\hat{\beta} - m^2c^4\hat{\boldsymbol{\alpha}}\right] \\
&= \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\alpha}} + \frac{1}{2E_+^2}\left[2c\hat{\mathbf{p}}\hat{H}_D - c^2(\hat{\mathbf{p}}^2 + m^2c^2)\hat{\boldsymbol{\alpha}}\right] \\
&= \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\alpha}} + \frac{1}{2E_+^2}\left(2c\hat{\mathbf{p}}\hat{H}_D - E_+^2\hat{\boldsymbol{\alpha}}\right) = \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\alpha}} + \frac{1}{E_+^2}c\hat{\mathbf{p}}\hat{H}_D - \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\alpha}},
\end{aligned} \tag{XXII.514}$$

es decir,

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}}_+ = \frac{c\hat{\mathbf{p}}\hat{H}_D}{E_+^2} = \frac{c\hat{\mathbf{p}}}{E_+}\hat{\Lambda}. \tag{XXII.515}$$

La versión clásica de esta expresión, $\mathbf{v} = c^2\mathbf{p}/E$, coincide con la correspondiente ley relativista. Más en general, resulta que las relaciones entre operadores de una partícula (es decir, operadores pares) de la teoría de Dirac son análogas a las correspondientes relaciones relativistas clásicas (y lo mismo se aplica a las relaciones de sus valores esperados, naturalmente). Por ejemplo, en el presente caso tenemos que la parte par del operador de velocidad es

$$\hat{\mathbf{v}}_+ = c\hat{\boldsymbol{\alpha}}_+ = \frac{c^2\hat{\mathbf{p}}}{E_+}\hat{\Lambda}, \tag{XXII.516}$$

por lo que para estados positivos resulta $\hat{\mathbf{v}}_+ = c^2\hat{\mathbf{p}}/E_+$, mientras que para estados de energía negativa se obtiene $\hat{\mathbf{v}}_+ = -c^2\hat{\mathbf{p}}/E_+ = c^2\hat{\mathbf{p}}/E_-$; en ambos casos se cumple la ley relativista $\hat{\mathbf{v}}_+ = c^2\hat{\mathbf{p}}/E$. Puesto que esta velocidad es análoga a la clásica, la sustitución $\hat{\mathbf{v}} \to \hat{\mathbf{v}}_+$ sustrae de la velocidad la componente que corresponde al zitterbewegung. Lo anterior muestra que, desde el punto de vista formal, es la interferencia entre los estados de energía positiva y negativa la que genera el zitterbewegung.

Una coordenada de posición libre del fenómeno de zitterbewegung, es decir, la que podría considerarse el análogo de la posición clásica, es sugerida por la conclusión del último párrafo: ésta sería la parte par de $\mathbf{r}$, $\hat{\mathbf{r}}_+$. Este operador se puede obtener con facilidad a partir de la relación en la representación momental

$$\hat{\Lambda}\hat{r}_k - \hat{r}_k\hat{\Lambda} = -i\hbar\frac{\partial\hat{\Lambda}}{\partial p_k}. \tag{XXII.517}$$

De aquí sigue que

$$\hat{\mathbf{r}}_+ = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\Lambda}\hat{\mathbf{r}}\hat{\Lambda}) = \hat{\mathbf{r}} + \frac{i\hbar c\hat{\Lambda}}{2E_+}\hat{\boldsymbol{\alpha}} - \frac{i\hbar c^2}{2E_+^2}\hat{\mathbf{p}} \tag{XXII.518}$$

y

$$\frac{d\hat{\mathbf{r}}_+}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathbf{r}}_+, \hat{H}_D] = \frac{c^2\hat{\mathbf{p}}}{E_+}\hat{\Lambda}, \tag{XXII.519}$$

que es el mismo resultado dado en (XXII.516). En otras palabras, se cumple la relación clásica

$$\hat{\mathbf{v}}_+ = \frac{d\hat{\mathbf{r}}_+}{dt}. \tag{XXII.520}$$

* **XXII.19** Tradicionalmente se ha considerado el neutrino del electrón como un fermión neutro de masa idénticamente nula. Desarrolle la teoría de estas partículas descritas por la ecuación de Dirac en términos de espinores de dos componentes.

Procediendo como en el problema XXII.17, escribimos la ecuación de Dirac para estados estacionarios en términos de dos espinores de dos componentes en la forma

$$\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_B = \frac{1}{c}\left(E - mc^2\right)\psi_A, \tag{XXII.521}$$

$$\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_A = \frac{1}{c}\left(E + mc^2\right)\psi_B. \tag{XXII.522}$$

Como en el presente caso la masa de la partícula se toma como nula[4], queda

$$\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_B = \frac{E}{c}\psi_A, \quad \hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\psi_A = \frac{E}{c}\psi_B, \tag{XXII.523}$$

[4]En la actualidad se considera seriamente la posibilidad de que la masa del neutrino del electrón no sea estrictamente cero. Sin embargo, se sabe que no es mayor que unos pocos eV.

que conviene reescribir en la forma

$$\psi_A = \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \frac{\hat{\mathbf{p}}c}{E}\psi_B, \quad \psi_B = \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \frac{\hat{\mathbf{p}}c}{E}\psi_A,$$

o bien, de manera más condensada

$$\psi_A = (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})\psi_B, \quad \psi_B = (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})\psi_A, \tag{XXII.524}$$

donde $\hat{\mathbf{n}}$ es un vector unitario paralelo al momento para soluciones positivas, para las que $E = cp$, y antiparalelo para soluciones negativas, $E = -cp$:

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}c}{E} = \varepsilon\frac{\hat{\mathbf{p}}}{p}, \quad E = \varepsilon cp, \quad \varepsilon = \pm 1. \tag{XXII.525}$$

El espinor de Dirac es

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_A \\ (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})\psi_A \end{pmatrix}. \tag{XXII.526}$$

De las expresiones anteriores sigue, tomando en cuenta que $(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 = \hat{\mathbf{n}}^2 = 1$,

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})\Psi = \begin{pmatrix} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})\psi_A \\ \psi_A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_B \\ \psi_A \end{pmatrix}, \tag{XXII.527}$$

lo que muestra que el operador pseudoescalar $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ intercambia las dos componentes ψ_A, ψ_B. La acción de este operador sobre la función de onda de la partícula de masa en reposo nula equivale a la de la matriz $\begin{pmatrix} \hat{O} & \mathbb{I} \\ \mathbb{I} & \hat{O} \end{pmatrix}$. Como se ve en el ejercicio XXII.30, salvo por su signo, ésta es la matriz

$$\hat{\gamma}_5 = \hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_4, \tag{XXII.528}$$

por lo que podemos escribir

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \begin{pmatrix} \hat{O} & \mathbb{I} \\ \mathbb{I} & \hat{O} \end{pmatrix} = -\hat{\gamma}_5. \tag{XXII.529}$$

Incidentalmente, esto muestra que la matriz $\hat{\gamma}_5$ se comporta como un pseudoescalar; de aquí su importancia en la teoría de los operadores de Dirac. Estos resultados sugieren la posibilidad de describir el neutrino con dos nuevas funciones de onda espinoriales, definidas como

$$\varphi_1 = \frac{1}{2}(\psi_A + \psi_B) = \frac{1}{2}(1 + \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})\psi_A, \tag{XXII.530}$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{2}(\psi_A - \psi_B) = \frac{1}{2}(1 - \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})\psi_A. \tag{XXII.531}$$

Sumando y restando las ecuaciones (XXII.524) y combinando con (XXII.530) se obtienen las ecuaciones que satisfacen los nuevos espinores:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}}\varphi_1 = \varphi_1, \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}}\varphi_2 = -\varphi_2. \tag{XXII.532}$$

En palabras, los espinores φ_1 y φ_2 son las funciones propias del operador $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{n}$, que representa la componente del espín del neutrino sobre la dirección del momento (como sigue de (XXII.525)); el valor propio $+1$ de este operador (para φ)

corresponde a espín paralelo al momento, y el valor propio -1, a espín antiparalelo. Por esta razón al operador $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{n}$ (o, equivalentemente, al operador $\hat{\gamma}_5$) se le llama*operador de helicidad*. Denotando este operador con $\hat{h}$, tenemos

$$\hat{h} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}}, \tag{XXII.533}$$

$$\hat{h}\varphi_1 = \varphi_1, \quad \hat{h}\varphi_2 = -\varphi_2. \tag{XXII.534}$$

Esta última ecuación muestra explícitamente a φ_1 y φ_2 como los eigenestados de $\hat{h}$. El operador de helicidad es hermitiano, pseudoescalar, de traza nula y con valores propios ± 1. De (XXII.532) sigue que los espinores φ_1 y φ_2, normalizados, son (véase el ejercicio XXII.31):

$$\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2(n'_z+1)}} \begin{pmatrix} n'_z + 1 \\ n'_x + in'_y \end{pmatrix}, \tag{XXII.535}$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2(n'_z+1)}} \begin{pmatrix} -n'_x + in'_y \\ n'_z + 1 \end{pmatrix}, \tag{XXII.536}$$

cuyos valores propios son $+1$ y -1, respectivamente. Con esta selección, los biespinores de Dirac, solución de la ecuación de Dirac para partícula libre, son:

$$u_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \varphi_\sigma \\ \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}}' \varphi_\sigma \end{pmatrix}, \quad \text{(energía positiva)} \tag{XXII.537}$$

$$v_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}}' \varphi_\sigma \\ \varphi_\sigma \end{pmatrix}, \quad \text{(energía negativa)} \tag{XXII.538}$$

($\mathbf{n}' = \varepsilon\hat{\mathbf{n}}$, de tal forma que $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}}' = \varepsilon(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}})$; además, $\sigma = 1, 2$ en ambos casos, en correspondencia con los estados de helicidad) son eigenestados simultáneos del hamiltoniano de Dirac, del operador de helicidad y del operador $\hat{\gamma}_5$.

En el caso de una partícula masiva, es posible fijar libremente el estado de polarización en el sistema en reposo de la partícula. Para el caso presente, con $m = 0$, no existe más tal sistema de referencia en reposo y la única manera de fijar la polarización es a través de los estados de helicidad, por lo que la polarización*siempre* ocurre en o contra la dirección del movimiento. Es más, el experimento muestra que sólo se realizan ciertos estados de polarización: los neutrinos del electrón tienen helicidad izquierda (-1), y los correspondientes antineutrinos, helicidad derecha ($+1$). De esta manera, para describir un neutrino del electrón, basta el espinor de dos componentes φ_1. La manera más natural de garantizar que se cumple esta propiedad consiste en imponer una condición adecuada, que restrinja las soluciones de energía positiva al espinor con helicidad negativa. Esto se logra, por ejemplo, demandando que el espinor de Dirac del neutrino cumpla la condición suplementaria

$$\hat{\gamma}_5 \Psi = \Psi, \tag{XXII.539}$$

es decir, que sea estado propio de $\hat{\gamma}_5$, en conformidad con la discusión anterior. La teoría así construida se conoce con el nombre de*teoría de dos componentes*.

Como $\hat{\gamma}_5$ es una integral de movimiento para el neutrino, a menudo resulta conveniente construir una representación de las matrices de Dirac en la que $\hat{\gamma}_5$ es

diagonal. Ésta es la llamada*representación quiral*, que tiene la forma:

$$\hat{\gamma}_i = \begin{pmatrix} \hat{O} & -i\hat{\sigma}_i \\ i\hat{\sigma}_i & \hat{O} \end{pmatrix}, \quad \hat{\gamma}_4 = \begin{pmatrix} \hat{O} & \mathbb{I} \\ \mathbb{I} & \hat{O} \end{pmatrix}; \tag{XXII.540}$$

$$\hat{\gamma}_5 = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & \hat{O} \\ \hat{O} & -\mathbb{I} \end{pmatrix}. \tag{XXII.541}$$

Esta representación (que es sustancialmente la de Kramers-Weyl dada por las ecuaciones (T22.52) del texto) es particularmente útil en la teoría de dos componentes.

XXII.20 Muestre que el concepto de helicidad, definido como el eigenvalor del operador $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}/p$, puede usarse para la descripción de partículas masivas, y establezca la relación que existe entre él y la matriz $\hat{\gamma}_5$ en general.

Definimos el operador

$$\hat{\sigma}_p = \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{p}. \tag{XXII.542}$$

Este operador es una generalización del operador $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ (omitiendo el factor ε del signo de la energía) que se usa en la ecuación (XXII.529) y representa la componente de la matriz $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ (del espín del electrón) a lo largo del momento de la partícula. Se trata de estudiar su utilidad general con referencia a un fermión masivo de espín $1/2$. Es claro que cuando $m = 0$, $\hat{\sigma}_p = \varepsilon\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}}$

El hamiltoniano de Dirac para esta partícula en movimiento libre está dado por la ecuación (XXII.116), la que se puede reescribir en la forma

$$\hat{H} = c\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\beta}mc^2 = c\hat{\rho}_1\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\rho}_3 mc^2. \tag{XXII.543}$$

Como las matrices $\hat{\rho}_i$ y $\hat{\sigma}_j$ conmutan, sigue que

$$[\hat{\sigma}_p, \hat{H}] = 0, \tag{XXII.544}$$

y la helicidad resulta una integral de movimiento para la partícula libre, aun cuando su masa sea diferente de cero. Esto significa que la proyección del espín de la partícula en la dirección de su momento, se conserva.

Para establecer la conexión entre $\hat{\sigma}_p$ y $\hat{\gamma}_5$ procedemos como sigue. Usando la representación de Dirac-Pauli de las matrices de Dirac, se escribe

$$\hat{\alpha}_3\hat{\sigma}_3 = \hat{\rho}_1\hat{\sigma}_3^2 = \hat{\rho}_1 = -\hat{\gamma}_5 \tag{XXII.545}$$

y multiplicando por $\hat{\sigma}_3$ se obtiene

$$\hat{\sigma}_3\hat{\gamma}_5 = -\hat{\sigma}_3\hat{\alpha}_3\hat{\sigma}_3 = -\hat{\alpha}_3. \tag{XXII.546}$$

De aquí sigue que

$$(\hat{\sigma}_3\hat{p}_3)\hat{\gamma}_5 = -\hat{\alpha}_3\hat{p}_3 \Rightarrow \quad (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}})\hat{\gamma}_5 = -\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \tag{XXII.547}$$

Usando esta expresión, el hamiltoniano de Dirac (XXII.543) de partícula libre toma la forma

$$\hat{H} = -c(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}})\hat{\gamma}_5 + \hat{\beta}mc^2. \tag{XXII.548}$$

Consideremos un eigenestado de $\hat{H}$ con energía E; por tratarse de partícula libre es también estado propio de $\hat{\mathbf{p}}$, con eigenvalor $\mathbf{p}$. Para éste puede escribirse

$$c(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}})\hat{\gamma}_5 = E - \hat{\beta}mc^2; \tag{XXII.549}$$

multiplicando por $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ se obtiene

$$c\mathbf{p}^2\hat{\gamma}_5 = (E - \hat{\beta}mc^2)\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \tag{XXII.550}$$

de donde sigue que

$$\hat{\gamma}_5 = \frac{(E - \hat{\beta}mc^2)\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{c\mathbf{p}^2} = \frac{(E - \hat{\beta}mc^2)}{cp}\frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{p}, \tag{XXII.551}$$

es decir,

$$\hat{\gamma}_5 = \frac{E - \hat{\beta}mc^2}{cp}\hat{\sigma}_p. \tag{XXII.552}$$

Ésta es la relación buscada.

Cuando $m = 0$, puede escribirse $E = \varepsilon E_+ = \varepsilon cp$, y (XXII.552) se reduce a

$$\hat{\gamma}_5 = \varepsilon\frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{p} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \hat{h}, \tag{XXII.553}$$

recuperándose las ecuaciones (XXII.529) y (XXII.533). En el caso general, con h igual a la helicidad, es decir, el valor propio de $\hat{\sigma}_p$, se tiene para $\hat{\gamma}_5$:

$$\hat{\gamma}_5 = \frac{E - \hat{\beta}mc^2}{cp}h = \frac{\varepsilon E_+ - \hat{\beta}mc^2}{cp}h, \tag{XXII.554}$$

cuyos valores propios en general diferirán de ± 1 debido a la presencia del término de masa.

XXII.3. Ejercicios

XXII.21 Utilice el método sugerido en el problema XXII.1 con la equivalencia (XXII.16) para obtener la solución del problema de Klein-Gordon para el pozo uniforme esférico, a partir de la solución del correspondiente problema de Schrödinger.

XXII.22 Muestre que los valores esperados de E^2 y $\mathbf{p}^2$ calculados para un paquete general solución de la ecuación de Klein-Gordon, satisfacen la ecuación $\langle E^2 \rangle = c^2 \langle \mathbf{p}^2 \rangle + m^2c^4$.

XXII.23 Calcule el conmutador $[\hat{\rho}_i, \hat{\rho}_j]$ para las matrices $\hat{\rho}_k$ definidas en el problema XXII.2 (ecuación (T22.49) del texto). Demuestre que se cumplen relaciones del tipo $\hat{\rho}_3\hat{\rho}_1 = i\hat{\rho}_2$, etc., y establézcalas.

XXII.24 Demuestre la ecuación (XXII.147).

XXII.25 Demuestre que si $\hat{U}$ está dada por la ecuación (XXII.413), su inversa es la dada en (XXII.414).

XXII.26 Demuestre las ecuaciones (XXII.496) y (XXII.499) y verifique en detalle el método de determinación de los eigenvalores de la energía empleado al final del problema en conexión con esas fórmulas.

XXII.27 Considere el operador de signo para la ecuación de Dirac de partícula libre dado por la ecuación (XXII.511). Demuestre que este operador es hermitiano y unitario, con valores propios $\lambda = \pm 1$, y que estos valores propios son integrales de movimiento para la partícula libre. Construya con su ayuda los proyectores $\hat{\Pi}^{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \hat{\Lambda})$ y demuestre que estos operadores proyectan los estados de energía positiva y negativa, respectivamente, para partícula libre.

XXII.28 Demuestre que la parte par del operador $\hat{\beta}$ es

$$\hat{\beta}_+ = \frac{mc^2}{E_+^2}\hat{H}_D = \frac{mc^2}{E_+}\hat{\Lambda}.$$

XXII.29 Derive detalladamente las fórmulas (XXII.517)–(XXII.520).

XXII.30 En las aplicaciones se usa frecuentemente la matriz $\hat{\gamma}_5$ definida como el producto de las cuatro matrices $\hat{\gamma}_\mu$:

$$\hat{\gamma}_5 = \hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_4.$$

Demuestre que $\hat{\gamma}_5$ es hermitiana, que*anti*conmuta con las matrices $\hat{\gamma}_\mu$:

$$\hat{\gamma}_5\hat{\gamma}_\mu + \hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_5 = 0 \quad (\mu = 1, 2, 3, 4),$$

que $\hat{\gamma}_5^2 = 1$ y que en la representación de Dirac-Pauli tiene la forma

$$\hat{\gamma}_5 = \begin{pmatrix} \mathbb{O} & -\mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & \mathbb{O} \end{pmatrix}.$$

Demuestre que la posibilidad de diagonalizar $\hat{\gamma}_5$ como se hace en el problema XXII.18 resulta del hecho de que, para masa nula, el hamiltoniano de Dirac conmuta con $\hat{\gamma}_5$,

$$[\hat{\gamma}_5, \hat{H}_D] = 0.$$

Demuestre asimismo que esto implica que la ecuación de Dirac de partícula libre es invariante ante el cambio $\Psi \to \hat{\gamma}_5\Psi$.

XXII.31 Construya detalladamente los espinores y biespinores de Dirac dados por las ecuaciones (XXII.535)-(XXII.538) y verifique que poseen las propiedades referidas en el texto.

XXII.32 Verifique que las matrices definidas con las ecuaciones (XXII.540) y (XXII.541) satisfacen todas las propiedades demandadas de ellas.

XXIII. La electrodinámica estocástica

XXIII.1. Problemas del texto

XXIII.1 Con base en argumentos heurísticos similares a los usados en la sección 23.3 del texto, determine la energía del estado base del oscilador armónico.

Se trata de determinar la energía media de equilibrio de un oscilador armónico cargado (por ejemplo, un electrón) que se encuentra inmerso en un campo de radiación con densidad espectral

$$\rho_0(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{2\pi^2 c^3} \tag{XXIII.1}$$

que corresponde a la del vacío electromagnético.[1] En el caso no relativista la potencia radiada por una carga puntual acelerada está dada por la fórmula de Larmor

$$P(t) = \frac{2e^2}{3c^3}\left|\dot{\mathbf{v}}(t)\right|^2. \tag{XXIII.2}$$

De esta fórmula sigue que la potencia media radiada por un oscilador armónico unidimensional de frecuencia ω_0 que se mueve siguiendo la ley $x\,(t) = a\cos\omega_0 t$ es (el promedio se toma sobre un período, a energía constante)

$$\bar{P}_{\text{rad}} = \frac{2e^2}{3c^3}a^2\omega_0^4\overline{\cos^2\omega_0 t} = \frac{e^2}{3c^3}a^2\omega_0^4. \tag{XXIII.3}$$

Por otro lado, el teorema del virial aplicado al oscilador permite escribir (despreciando una vez más la radiación)

$$\bar{E} = 2\bar{V} = m\omega_0^2\overline{x^2} = \tfrac{1}{2}m\omega_0^2 a^2, \tag{XXIII.4}$$

donde $\bar{E}$ y $\bar{V}$ representan las energías media, total y potencial; de aquí sigue

$$a^2 = \frac{2\bar{E}}{m\omega_0^2}, \tag{XXIII.5}$$

por lo que la potencia media radiada se puede escribir en la forma

$$\bar{P}_{\text{rad}} = \frac{2e^2\omega_0^2}{3mc^3}\bar{E}. \tag{XXIII.6}$$

[1] Este problema se resuelve para densidad espectral arbitraria en la sección 1.5 del texto; lo que sigue es una versión más detallada de la solución dada ahí.

La determinación de la potencia media que el oscilador absorbe si se le sitúa en el seno de un campo de radiación con densidad espectral $\rho(\omega)$ es un tanto más elaborada, pero puede obtenerse como sigue: Partimos de la ecuación de movimiento del oscilador unidimensional

$$m\ddot{x} + m\omega_0^2 x - m\tau\, \dddot{x} = eE_x(x,t), \tag{XXIII.7}$$

con $\tau = 2e^2/3mc^3$.[2] Para campos externos no muy intensos y despreciando la radiación, esta ecuación se puede reducir a $\ddot{x} + \omega_0^2 x \simeq 0$, lo que nos permite aproximar $\tau\, \dddot{x} \simeq -\tau\omega_0^2 \dot{x}$; de esta manera (XXIII.7) se reduce a la ecuación de segundo orden

$$m\ddot{x} + m\omega_0^2 x + \tau m\omega_0^2 \dot{x} = eE_x(x,t). \tag{XXIII.8}$$

Multiplicando por $\dot{x}$ y tomando el valor esperado sobre las realizaciones del campo, se obtiene

$$\begin{aligned} m\left\langle \dot{x}\left(\ddot{x} + \omega_0^2 x\right)\right\rangle &= \frac{d}{dt}\left\langle \tfrac{1}{2}m\dot{x}^2 + \tfrac{1}{2}m\omega_0^2 x^2\right\rangle = \frac{d\bar{E}}{dt} \\ &= \left\langle \dot{x}\left(eE_x(x,t) - \tau m\omega_0^2 \dot{x}\right)\right\rangle \equiv \bar{P}_{\text{abs}} - \bar{P}_{\text{rad}}, \end{aligned} \tag{XXIII.9}$$

en donde hemos identificado la potencia media radiada y la potencia media absorbida, dadas, respectivamente, por

$$\bar{P}_{\text{rad}} = \frac{2e^2}{3c^3}\left\langle \dot{x}^2(t)\right\rangle^2 = \frac{2e^2\omega_0^2}{3c^3}\left\langle x^2(t)\right\rangle^2, \tag{XXIII.10}$$

$$\bar{P}_{\text{abs}} = e\left\langle \dot{x}E_x(x,t)\right\rangle. \tag{XXIII.11}$$

La ecuación (XXIII.9) muestra que, en efecto, la energía media del oscilador cambia sólo cuando la absorción y la radiación de energía por el oscilador pierden su balance.

Para usar la ecuación (XXIII.11) es conveniente emplear la representación de Fourier del campo $E_x(t)$ y de la solución $x(t)$ de la ecuación diferencial (XXIII.8). Como se discute en el problema XXIII.4 y en el texto, en la aproximación de onda larga podemos escribir la solución en la forma aproximada

$$x(t) = \frac{e}{m\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{E}(\omega)e^{i\omega t}}{\omega_0^2 + \left(i\omega + \frac{1}{2}\tau\omega_0^2\right)^2} d\omega, \tag{XXIII.12}$$

en donde se ha escrito

$$E_i(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{E}_i(\omega)\, e^{i\omega t} d\omega. \tag{XXIII.13}$$

Derivando (XXIII.12) respecto del tiempo se obtiene

$$\dot{x}(t) = \frac{ie}{m\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega\tilde{E}(\omega)e^{i\omega t}}{\omega_0^2 + \left(i\omega + \frac{1}{2}\tau\omega_0^2\right)^2} d\omega. \tag{XXIII.14}$$

[2] La ecuación (XXIII.8) y su solución se discuten con detalle en el problema XXIII.4.

Introduciendo (XXIII.13) y (XXIII.14) en (XXIII.11) y utilizando la ecuación (T23.10) (o (XXIII.42)), queda

$$\begin{aligned} e\left\langle \dot{x}E_x(x,t)\right\rangle &= \frac{2\pi i e^2}{3m}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\frac{\omega\rho(\omega')\delta\left(\omega'-\omega\right)}{\omega_0^2+\left(i\omega+\frac{1}{2}\tau\omega_0^2\right)^2} \\ &= \frac{2\pi i e^2}{3m}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\frac{\omega\rho(\omega)}{\omega_0^2+\left(i\omega+\frac{1}{2}\tau\omega_0^2\right)^2} \\ &= \frac{2\pi e^2}{3m}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\frac{-i\omega\rho(\omega)\left[\omega_0^2+\left(i\omega+\frac{1}{2}\tau\omega_0^2\right)^2\right]}{\left|\omega_0^2+\left(-i\omega+\frac{1}{2}\tau\omega_0^2\right)^2\right|^2} \\ &\simeq \frac{2\pi e^2}{3m}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\frac{i\omega\rho(\omega)\left(\omega_0^2-\omega^2-i\tau\omega_0^2\omega\right)}{\left|\omega_0^2+\left(i\omega+\frac{1}{2}\tau\omega_0^2\right)^2\right|^2} \\ &\simeq \frac{2\pi\tau e^2\omega_0^2}{3m}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\frac{\omega^2\rho(\omega)}{\left|\omega_0^2+\left(i\omega+\frac{1}{2}\tau\omega_0^2\right)^2\right|^2} \end{aligned} \qquad \text{(XXIII.15)}$$

Para pasar a la tercera igualdad se multiplicó por la conjugada del denominador; en el siguiente paso se tomó en cuenta que, debido a la agudeza de la resonancia, a la integral contribuyen sólo frecuencias muy cercanas a la de oscilación, por lo que se puede poner en el numerador $\omega_0^2-\omega^2\simeq 0$. Para realizar la integral aproximamos el denominador (evaluado muy cerca de la resonancia) como sigue

$$\begin{aligned} \left|\omega_0^2+\left(i\omega+\tfrac{1}{2}\tau\omega_0^2\right)^2\right|^2 &\simeq \left(\omega_0^2-\omega^2\right)^2+\tau^2\omega_0^4\omega^2 \\ &\simeq (\omega_0+\omega)^2(\omega_0-\omega)^2+\tau^2\omega_0^6 \\ &\simeq 4\omega_0^2\left[(\omega_0-\omega)^2+\tfrac{1}{4}\tau^2\omega_0^4\right] \end{aligned} \qquad \text{(XXIII.16)}$$

y utilizamos la fórmula, propia de la teoría de la función delta de Dirac,

$$\frac{\eta}{x^2+\eta^2}\underset{\eta\to 0^+}{\to}\pi\delta(x) \qquad \text{(XXIII.17)}$$

poniendo $\eta=\frac{1}{2}\tau\omega_0^2$. Se obtiene de esta manera

$$\bar{P}_{\text{abs}}=e\left\langle \dot{x}E_x(x,t)\right\rangle=\frac{2\pi^2e^2}{3m}\rho(\omega_0). \qquad \text{(XXIII.18)}$$

Es posible hacer una estimación simple (hasta un factor numérico del orden de la unidad) de $\bar{P}_{\text{abs}}$ a partir de un análisis dimensional, como sigue: Considerando que debido a la linearidad del problema $\bar{P}_{\text{abs}}\sim\bar{E}(\omega_0)\sim\rho(\omega_0)$ (la segunda relación será cierta aun en condiciones más generales) y que las únicas constantes físicas que pueden aparecer en la expresión para $\bar{P}_{\text{abs}}$ son e^2 y m (la potencia absorbida no puede depender del signo de la carga), debemos poner

$$\bar{P}_{\text{abs}}\sim e^{2a}m^b\rho(\omega_0).$$

Del análisis dimensional sigue de inmediato que $a=1$, $b=-1$, en concordancia con el resultado anterior.

El equilibrio estadístico ocurre cuando se establece un balance entre las potencias medias absorbida y radiada, como sigue de (XXIII.9). La energía de equilibrio se obtiene así al igualar las expresiones (XXIII.6) y (XXIII.18), lo que da

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}\bar{E}. \tag{XXIII.19}$$

En este resultado reconocemos la fórmula de Planck (ecuación (T1.28) de la sección 1.5 del texto) que establece la conexión general que existe entre la energía media de los osciladores de frecuencia ω en equilibrio con un campo de radiación, y la densidad espectral $\rho(\omega)$ de éste. Sustituyendo en esta última expresión la densidad espectral del campo de vacío dado por la ecuación (XXIII.1), se obtiene para la energía media el valor que predice la teoría de Schrödinger para el estado fundamental de los osciladores,

$$\bar{E} = \frac{\pi^2 c^3}{\omega^2}\rho(\omega) = \tfrac{1}{2}\hbar\omega. \tag{XXIII.20}$$

XXIII.2 Suponga que la densidad espectral del campo de radiación del vacío tiene la forma $\rho(\omega) = \lambda\omega^n$, donde λ es una constante. Determine el mínimo valor entero de n para el cual un átomo hidrogenoide posee un estado estacionario ligado, considerando la parte sistemática de la órbita como circular.

Antes de entrar en los detalles del problema es útil observar que un oscilador armónico puede alcanzar su estado de equilibrio cualquiera que sea la densidad espectral del campo de radiación en que se le coloque, como sigue de (XXIII.19). Esto continúa siendo válido aun cuando $\rho(\omega)$ depende de parámetros externos, como la temperatura, etc.; simplemente en este caso el valor de la energía media de equilibrio pasa a depender de tales parámetros. En cambio, para sistemas sujetos a fuerzas no lineales lo anterior no es cierto en general, y el equilibrio se puede alcanzar sólo bajo ciertas circunstancias, ya que en estos sistemas existen normalmente varias frecuencias relevantes y no sólo una, como en el caso del oscilador armónico. El problema del equilibrio de un átomo con un electrón cae en esta situación más compleja; sin embargo, en lo que sigue se hará toda una serie de aproximaciones para simplificar el problema del átomo, de tal forma que la solución que se habrá de obtener posee carácter meramente indicativo.

Consideraremos que la órbita media se puede tomar como esencialmente circular, de manera que $|\ddot{\mathbf{r}}| = \omega\,|\dot{\mathbf{r}}| = \omega^2 r$, con r constante. En la aproximación dipolar la potencia radiada por el electrón orbital está dada por la ecuación (XXIII.2), y es

$$P_{\text{rad}} = \frac{dW_{\text{rad}}}{dt} = \frac{2e^2}{3c^3}\omega^4 r^2. \tag{XXIII.21}$$

Para determinar la potencia media que el electrón absorbe del campo de fondo, aproximamos el movimiento orbital como una pareja de osciladores mutuamente ortogonales y de la misma frecuencia; la energía que cada uno de estos osciladores absorbe del campo está dada por la ecuación (XXIII.18), por lo que debemos escribir

$$P_{\text{abs}} = \frac{4\pi^2 e^2 \rho(\omega)}{3m}. \tag{XXIII.22}$$

Del teorema del virial aplicado a la órbita circular del problema de Kepler siguen las relaciones

$$\bar{E} = -\bar{T} = \tfrac{1}{2}\bar{V} = -\tfrac{1}{2}m\omega^2 r^2 = -\frac{Ze^2}{2r}, \tag{XXIII.23}$$

que permiten escribir

$$\left|\bar{E}\right| = \frac{A}{r}, \quad \omega = B\left|\bar{E}\right|^{3/2}, \tag{XXIII.24}$$

donde A y B son constantes que dependen de los parámetros, pero cuyo valor no es necesario precisar aquí. Con estas relaciones y poniendo $\rho(\omega) = \lambda\omega^n$, se obtiene para el cociente de la potencia absorbida y radiada

$$\kappa \equiv \frac{P_{\text{abs}}}{P_{\text{rad}}} = C'\frac{\rho(\omega)}{\omega^4 r^2} = C''\frac{\omega^{n-4}}{r^2} = \left|\frac{\bar{E}}{\bar{E}_e}\right|^{(3n-8)/2} = \left|\frac{r_e}{r}\right|^{(3n-8)/2}, \tag{XXIII.25}$$

donde C', C'', $\bar{E}_e$ y r_e representan constantes apropiadas. Como en equilibrio $\kappa = 1$, $\bar{E}_e$ representa la energía de equilibrio, cuyo valor se obtiene al igualar las expresiones (XXIII.21) y (XXIII.22)

$$\frac{2e^2}{3c^3}\omega^4 r^2 = \frac{4\pi^2 e^2}{3m}\rho(\omega), \tag{XXIII.26}$$

de donde sigue, usando una vez más (XXIII.24), que el radio y la energía de la órbita de equilibrio están dados por

$$r_e^2 = \frac{2\pi^2 c^3}{m\omega^4}\rho(\omega), \quad \bar{E}_e = -\frac{\pi^2 c^3}{\omega^2}\rho(\omega). \tag{XXIII.27}$$

Supongamos ahora que el electrón orbital pierde energía y empieza a caer hacia el núcleo; para que la cantidad $(r_e/r)^{(3n-8)/2}$ describa este comportamiento debe ser mayor que 1, lo que se obtiene sólo para $3n - 8 > 0$, o sea $n > 8/3$. Si éste es el caso, se cumple por (XXIII.25) que $\kappa > 1$ y el sistema absorbe más energía de la que radía, lo que tiende a restablecer el equilibrio perdido. En estas condiciones, si el electrón empezara a alejarse del núcleo se tendría de la última igualdad de (XXIII.25) que $\kappa < 1$, y el sistema radiaría más de lo que absorbe, recuperándose el equilibrio. Concluimos que el mínimo valor entero de n que garantiza la existencia de órbitas estables es $n = 3$.

De la conclusión anterior siguen dos observaciones interesantes. La primera es que un *ruido blanco* (cuyo espectro es uniforme y corresponde a $n = 0$) no puede sostener un sistema atómico de manera estable. La segunda es que la densidad espectral del vacío dada por la ecuación (XXIII.1), la cual, se puede demostrar, es la única consistente con la demanda de invariancia relativista, es a la vez la más simple posible de entre las que permiten la existencia de sistemas atómicos estables.

Una manera alternativa de determinar el valor mínimo de n que garantiza estabilidad atómica es la siguiente: De (XXIII.27) sigue que la energía de las órbitas circulares estables debe ser de la forma

$$\bar{E}_e = -\pi^2\lambda c^3\omega_e^{n-2}. \tag{XXIII.28}$$

Pero según (XXIII.24), para estos estados $\left|\bar{E}_e\right| \sim \omega_e^{2/3}$, lo que, sustituido en (XXIII.28), conduce a que el valor mínimo de n que garantiza estabilidad es tal que $n_{\text{mín}} - 2 = 2/3$, o sea $n_{\text{mín}} = 8/3$, en coincidencia con el resultado anterior.

Por otro lado, si en (XXIII.28) sustituimos los valores $\lambda = \hbar/2\pi^2c^3$ y $n = 3$, obtenemos

$$\bar{E}_e = -\frac{\hbar}{2}\omega_e. \tag{XXIII.29}$$

De (XXIII.23) sigue la relación entre el radio y la frecuencia de la órbita descrita por la tercera ley de Kepler,

$$r_e^3 = \frac{Ze^2}{m\omega_e^2}, \tag{XXIII.30}$$

que sustituida en (XXIII.26) junto con los valores de λ y n, conduce a

$$\omega_e = \frac{Z^2e^4m}{\hbar^3}, \tag{XXIII.31}$$

con lo cual resulta

$$E_e = -\frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2}, \tag{XXIII.32}$$

$$r_e = \frac{\hbar^2}{Ze^2m}. \tag{XXIII.33}$$

Los resultados anteriores coinciden con los que predice la teoría de Schrödinger para los valores esperados apropiados.

El estudio de este tema se complementa en el problema XXIII.11.

XXIII.3 Derive detalladamente la ecuación (T23.11).

Se debe derivar la ecuación

$$\langle E_i\,(s+t)\,E_j\,(s)\rangle = \delta_{ij}\frac{2\pi}{3}\int_{-\infty}^{\infty}\rho_0\,(\omega)\,e^{i\omega t}d\omega \tag{XXIII.34}$$

que establece la conexión entre la densidad espectral de un campo de radiación estacionario y la (auto)correlación de las componentes cartesianas de su vector eléctrico $E_i(t)$, cuando éstas son estadísticamente independientes. De hecho, esta relación entre la función de (auto)correlación del campo y su densidad espectral (o su espectro de potencia $S(\omega) = (4\pi/3)\rho(\omega)$) es general y vale,*mutatis mutandis*, para cualquier función aleatoria $E(t)$ que admita una transformación de Fourier; se le conoce con el nombre genérico de*teorema de Wiener-Khinchin*. En el caso del campo electromagnético, el vector $E_i(t)$ depende también del punto del espacio considerado, es decir, se tiene en realidad $E_i(\mathbf{r}, t)$. Esto significa que deberíamos escribir la correlación (XXIII.34) en la forma $\langle E_i(\mathbf{r}, s+t)E_j(\mathbf{r}', s)\rangle$, como una función de dos puntos y dos tiempos. Aunque esto no modifica los cálculos que siguen (para $\mathbf{r}$ y $\mathbf{r}'$ fijas), es más cómodo omitir esta dependencia, como se hace en lo que sigue. En el problema XXIII.5 (y en la sección 23.4 del texto) se discute con más detalle este punto.

Consideremos una componente cartesiana del vector eléctrico $\mathbf{E}(t)$, expresada en términos de su transformada de Fourier en la forma

$$E_i\,(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{E}_i\,(\omega)\,e^{-i\omega t}d\omega. \tag{XXIII.35}$$

Como $E_i(t)$ es una variable estocástica, también su amplitud de Fourier $\tilde{E}_i(\omega)$ lo es; en particular, cuando el promedio de $E_i(t)$ sobre el conjunto de sus posibles

realizaciones se anula, $\langle E_i(t)\rangle = 0$ (como ocurre con el campo de vacío), de (XXIII.35) sigue que también

$$\left\langle \tilde{E}_i(\omega)\right\rangle = 0. \tag{XXIII.36}$$

Para construir la función de autocorrelación del campo la expresamos, con ayuda de la transformada de Fourier (XXIII.35), en la forma

$$\left\langle E_i\left(t'\right)E_j\left(t\right)\right\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left\langle \tilde{E}_i\left(\omega'\right)\tilde{E}_j\left(\omega''\right)\right\rangle e^{-i\omega' t'-i\omega'' t}d\omega'' d\omega'. \tag{XXIII.37}$$

Con el cambio de variable $\omega'' = -\omega$ se obtiene

$$\left\langle E_i\left(t'\right)E_j\left(t\right)\right\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left\langle \tilde{E}_i\left(\omega'\right)\tilde{E}_j\left(-\omega\right)\right\rangle e^{-i\omega' t'}e^{i\omega t}d\omega d\omega'. \tag{XXIII.38}$$

Por otra parte, considerando que $E_i(t)$ es una variable real y haciendo el cambio de variable $\omega \to -\omega$, se obtiene sucesivamente de (XXIII.35)

$$\begin{aligned} E_i(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{E}_i(\omega)e^{-i\omega t}d\omega = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{E}_i(-\omega)e^{i\omega t}d\omega \\ &= E_i^*(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{E}_i^*(\omega)e^{i\omega t}d\omega, \end{aligned} \tag{XXIII.39}$$

de donde sigue que

$$\tilde{E}_i^*\left(\omega\right) = \tilde{E}_i\left(-\omega\right). \tag{XXIII.40}$$

Sustituyendo este resultado en (XXIII.38) se obtiene

$$\left\langle E_i\left(t'\right)E_j\left(t\right)\right\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left\langle \tilde{E}_i\left(\omega'\right)\tilde{E}_j^*\left(\omega\right)\right\rangle e^{-i(\omega' t'-\omega t)}d\omega d\omega'. \tag{XXIII.41}$$

Para seguir adelante es necesario conocer las propiedades estadísticas del campo. Una hipótesis fundamental en la electrodinámica estocástica consiste en suponer que las componentes de Fourier del campo de vacío que corresponden a diferentes frecuencias no están correlacionadas, por lo que se propone[3]

$$\left\langle \tilde{E}_i\left(\omega\right)\tilde{E}_j^*\left(\omega'\right)\right\rangle = \pi S_{ij}(\omega)\delta\left(\omega-\omega'\right). \tag{XXIII.42}$$

Las cantidades $S_{ij}(\omega)$ son las componentes del tensor del *espectro de potencia*. La condición (XXIII.42), que expresa la independencia estadística de las componentes de Fourier de frecuencias diferentes, permite sin embargo la existencia de correlaciones entre las componentes del campo $E_i(t)$, $E_j(t')$ para intervalos de tiempo $t'-t$ arbitrariamente largos, dependiendo de la estructura del espectro de potencia. Una simplifiación análoga a (XXIII.42) pero en el dominio del tiempo se da sólo en el caso más simple posible, $S_{ij}(\omega) = \text{const}$, que corresponde al ruido blanco, para el cual se cumple que

$$\left\langle E_i\left(t'\right)E_j\left(t\right)\right\rangle = A\delta\left(t'-t\right), \tag{XXIII.43}$$

[3]El factor π es opcional y se debe a la forma en que se define la transformada de Fourier del campo.

lo que significa que las correlaciones entre las componentes $E_i(t')$, $E_j(t)$ se dan sólo durante intervalos $t'-t$ infinitesimalmente pequeños. Para este ruido, de (XXIII.41) sigue que debe cumplirse que

$$\left\langle \tilde{E}_i\left(\omega'\right)\tilde{E}_j^*\left(\omega\right)\right\rangle = \text{const}\cdot\delta\left(\omega-\omega'\right), \tag{XXIII.44}$$

es decir, $S_{ij}(\omega)=\text{const}$, como se señaló anteriormente. Este espectro uniforme es precisamente la razón por la que a un ruido con función de correlación proporcional a $\delta(t'-t)$ se le califica de*blanco*. Cuando el espectro no es uniforme, al correspondiente proceso se le califica en general de*coloreado*. En todo proceso aleatorio coloreado existen correlaciones entre las componentes temporales del campo que se extienden por intervalos de tiempo finitos.

Combinando (XXIII.41) y (XXIII.42) se obtiene

$$\begin{aligned}\left\langle E_i(t')E_j(t)\right\rangle &= \tfrac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}S_{ij}(\omega)\delta\left(\omega-\omega'\right)e^{-i\omega' t'}e^{i\omega t}d\omega d\omega' \\ &= \tfrac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}S_{ij}(\omega)e^{-i\omega(t'-t)}d\omega=\int_0^{\infty}S_{ij}(\omega)\cos\omega(t'-t)d\omega.\end{aligned} \tag{XXIII.45}$$

En la electrodinámica estocástica se considera que las amplitudes de Fourier que corresponden a diferentes componentes cartesianas del campo son estadísticamente independientes, o sea

$$S_{ij}(\omega)=S(\omega)\delta_{ij}, \tag{XXIII.46}$$

y, por lo tanto,

$$\left\langle \tilde{E}_i\left(\omega\right)\tilde{E}_j^*\left(\omega'\right)\right\rangle = S(\omega)\delta_{ij}\delta\left(\omega-\omega'\right). \tag{XXIII.47}$$

Con esto la expresión (XXIII.45) se reduce a

$$\left\langle E_i\left(t'\right)E_j\left(t\right)\right\rangle = \delta_{ij}\int_0^{\infty}S(\omega)\cos\omega(t'-t)d\omega. \tag{XXIII.48}$$

La función escalar $S(\omega)$ se conoce también como*espectro de potencia*. Para escribir la última igualdad se tomó en cuenta la ecuación (XXIII.40), de la que sigue que para campos reales

$$S(\omega)=S(-\omega)=S^*(\omega). \tag{XXIII.49}$$

La ecuación (XXIII.48) es la forma más simple que adopta el teorema de Wiener-Khinchin mencionado previamente.

Para expresar el resultado anterior en términos de la densidad espectral de energía, consideremos el caso particular $t'=t$,

$$\left\langle E_i\left(t\right)E_j\left(t\right)\right\rangle = \delta_{ij}\int_0^{\infty}S(\omega)d\omega. \tag{XXIII.50}$$

De aquí sigue que la densidad media de energía del campo de radiación es (tomando en cuenta que el campo de vacío es isotrópico y que $\left\langle\mathbf{E}^2(t)\right\rangle=\left\langle\mathbf{B}^2(t)\right\rangle$)

$$\begin{aligned}\bar{u} &= \int_0^{\infty}\rho(\omega)d\omega \\ &= \frac{1}{8\pi}\left\langle\mathbf{E}^2(t)+\mathbf{B}^2(t)\right\rangle=\frac{1}{4\pi}\left\langle\mathbf{E}^2(t)\right\rangle=\frac{3}{4\pi}\left\langle {E_i}^2(t)\right\rangle \\ &= \frac{3}{4\pi}\int_0^{\infty}S(\omega)d\omega.\end{aligned} \tag{XXIII.51}$$

Comparando los dos integrandos se obtiene la relación general que existe entre el espectro de potencia y la densidad espectral del campo:

$$\rho(\omega) = \frac{3}{4\pi} S(\omega). \tag{XXIII.52}$$

Introduciendo este resultado en (XXIII.48) y simplificando se obtiene

$$\langle E_i\,(t+s)\,E_j\,(s)\rangle = \delta_{ij}\frac{4\pi}{3}\int_0^\infty \rho(\omega)\cos\omega t\,d\omega, \tag{XXIII.53}$$

que equivale a (T23.11) o (XXIII.34).

De (XXIII.42) y (XXIII.52) se obtiene para el caso isotrópico y homogéneo

$$\left\langle \tilde{E}_i\,(\omega)\,\tilde{E}_j^*\left(\omega'\right)\right\rangle = \delta_{ij}\frac{4\pi^2}{3}\rho(\omega)\delta\left(\omega-\omega'\right). \tag{XXIII.54}$$

XXIII.4 Construya la solución general $x(t)$ para el oscilador armónico inmerso en el campo de punto cero con condiciones iniciales arbitrarias y demuestre que la solución estacionaria (asintótica para $t \to \infty$) está dada aproximadamente por la ecuación (T23.12).

La ecuación de movimiento aproximada para un oscilador unidimensional de frecuencia ω_0 que se mueve en el seno del campo de punto cero con densidad espectral $\rho(\omega)$ dada por la ecuación (XXIII.1), es (cf. (T1.25), (T23.5))

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x - \tau\,\dddot{x} = \frac{e}{m}E(x,t), \tag{XXIII.55}$$

en donde $E(x,t)$ representa la componente x del campo de punto cero. La ecuación (XXIII.55) se resolverá en la *aproximación de onda larga*, es decir, se supondrá que el campo $E(x,t)$ es esencialmente uniforme en todas las posiciones $x(t)$ ocupadas por el oscilador, de tal manera que se puede escribir aproximadamente $E(x,t) \approx E(x_C,t) = E(t)$, donde x_C es una coordenada fija asociada a la partícula, como podría ser, por ejemplo, el valor medio $\overline{x(t)}$. Puesto que se trata de un punto fijo que juega el papel de un parámetro, se puede escribir simplemente $E(x_C,t) = E(t)$, como se hizo arriba. Esta aproximación es legítima cuando la amplitud de los movimientos de interés es mucho más pequeña que la menor de las longitudes de onda del campo involucradas, de donde proviene su nombre. Hacer esta simplificación en el estudio de la interacción de un sistema mecánico (oscilador, átomo, etc.) con el campo de radiación equivale normalmente a considerar sólo el acoplamiento dipolar del primero con el campo; por esta razón con frecuencia se identifican la aproximación dipolar con la de onda larga. En la aproximación de onda larga la transformada de Fourier del campo está dada por la ecuación (XXIII.35) con $\tilde{E}_i(x,\omega) = \tilde{E}_i(x_C,\omega) = \tilde{E}_i(\omega)$.

El término $-m\tau\ \dddot{x}$ en la ecuación (XXIII.55) corresponde a la fuerza de reacción de radiación, y toma en cuenta el retroceso de la partícula debido a la radiación de Larmor; el parámetro τ lo determina la electrodinámica clásica, y su valor está dado por la ecuación (T23.6),

$$\tau = \frac{2e^2}{3mc^3}. \tag{XXIII.56}$$

Para un electrón, $\tau \simeq 10^{-23}$. Este pequeño valor de τ hace que $\tau\omega \ll 1$ para todas las frecuencias de interés práctico. En la electrodinámica clásica una ecuación

como la (XXIII.55) que incluye la reacción de radiación se llama*ecuación de Abraham-Lorentz*. Pero como (XXIII.55) contiene también una fuerza estocástica se asemeja asimismo a lo que en la teoría de procesos estocásticos se conoce como una*ecuación de Langevin*. En la forma específica de la electrodinámica estocástica, que corresponde a una ecuación estocástica para ruido coloreado con reacción de radiación, se le llama*ecuación de Braffort-Marshall*.

La reacción de radiación proporciona una descripción *aproximada* del efecto de la emisión de radiación sobre la propia partícula emisora. La aproximación es, en general, aceptable, aunque puede dar lugar a dificultades, como la aparición de soluciones divergentes. Estas soluciones divergentes pueden ser eliminadas mediante el siguiente procedimiento, que se expone aquí por razones de completez. Reescribimos la ecuación (XXIII.55) en la forma

$$\ddot{x} - \tau \dddot{x} = \frac{1}{m} f(t) + \frac{e}{m} E(t), \tag{XXIII.57}$$

donde, para dar mayor generalidad a la derivación, escribimos $f(t)$ (que equivale a $f(x(t))$) en vez de $-m\omega_0^2 x$. Introducimos un factor de integración $\mu(t)$ que nos permita asociar la reacción de radiación y la aceleración:

$$\frac{d}{dt}\ddot{x}\mu(t) = \dot{\mu}\ddot{x} + \mu \dddot{x} = \left(\ddot{x} - \tau \dddot{x}\right) \dot{\mu}(t), \tag{XXIII.58}$$

de donde sigue que debe tomarse $\mu = \exp(-t/\tau)$. Combinando esta última expresión con (XXIII.57) obtenemos

$$\frac{d}{dt}\ddot{x}\mu(t) = \dot{\mu}(t) \left(\frac{1}{m} f + \frac{e}{m} E\right) = -\frac{1}{m\tau} \mu(t) \left(f + eE\right), \tag{XXIII.59}$$

para obtener por integración

$$\ddot{x} = -\frac{1}{m\tau} e^{t/\tau} \left\{ \int^t e^{-t'/\tau} \left[f(x(t')) + eE(t') \right] dt' + A \right\}. \tag{XXIII.60}$$

Si se asigna un valor finito al factor entre corchetes en (XXIII.60), la aceleración $\ddot{x}$ se hace infinita para $t = \infty$; este desbordamiento de la aceleración es el problema a que nos referíamos arriba, y es evidencia de que la aproximación descrita por la ecuación de Abraham-Lorentz es ciertamente insatisfactoria y debe manejarse con cuidado. Una cura parcial a este problema se obtiene demandando que la aceleración*final* sea una constante especificada (que tomaremos, como se hace usualmente, igual a cero), pues esta condición fija el valor de la constante de integración A en (XXIII.60) como

$$A = \frac{1}{m\tau} \int^\infty e^{-(t'-t)/\tau} \left[f(x(t')) + eE(t') \right] dt', \tag{XXIII.61}$$

que reinsertado en la ecuación anterior la reduce a

$$m\ddot{x} = \frac{1}{\tau} \int_t^\infty e^{-(t'-t)/\tau} \left[f\left(x\left(t'\right)\right) + eE(t') \right] dt', \tag{XXIII.62}$$

o bien, con el cambio de variable $s = (t' - t)/\tau$,

$$m\ddot{x} = \int_0^\infty e^{-s} \left[f\left(x\left(t + \tau s\right)\right) + eE(t + \tau s) \right] ds. \tag{XXIII.63}$$

El problema de la aceleración se ha resuelto, pero a expensas de introducir uno nuevo, pues ahora la aceleración al tiempo t queda determinada por las fuerzas externas a*todos* los tiempos*posteriores* $t+\tau s$, $s\in(0,\infty)$; éste es el "fenómeno" de*preaceleración*, que es obviamente afísico. Desde una posición pragmática tiende a considerarse este fenómeno como no importante, pues debido al exponencial en el integrando de (XXIII.63) sólo hay contribuciones significativas para s no mucho mayor que la unidad, digamos, para $s<10$, pero para estos valores de s los tiempos de adelanto τs son insignificantes; de hecho, son irrelevantes no sólo en el dominio clásico, sino aun en el cuántico, pues dentro de estos intervalos de tiempo las fluctuaciones cuánticas son suficientemente intensas como para opacar ampliamente la diferencia $f(t+\tau s)-f(t)$. Sin embargo, ninguna consideración de esta naturaleza puede modificar el hecho de que la ecuación es acausal de principio. Otra manifestación de esta misma dificultad se da en el proceso mismo de la derivación que condujo a la ecuación (XXIII.63), pues se hizo necesario imponer una condición final sobre la aceleración, lo que es conceptualmente poco satisfactorio, ya que el movimiento instantáneo de la partícula no puede estar regido por la condición que alcanzará mucho tiempo después.

Dado que la ecuación integro-diferencial (XXIII.63) es demasiado complicada para las aplicaciones, se le simplifica desarrollando $f(x(t'))$ alrededor de $x(t)$ y tomando en cuenta la pequeñez de τ para cortar el desarrollo a orden τ, con lo que se obtiene

$$f\left(x\left(t+\tau s\right)\right)=f\left(x\left(t\right)\right)+\tau s\frac{df\left(x\left(t\right)\right)}{dt}+\cdots=f\left(x\left(t\right)\right)+\tau s\dot{x}\frac{df\left(x\left(t\right)\right)}{dx}+\cdots \tag{XXIII.64}$$

Con esto, (XXIII.63) puede escribirse como

$$m\ddot{x}=f\left(x\right)\int_0^\infty e^{-s}ds+\tau\dot{x}\frac{df\left(x\right)}{dx}\int_0^\infty se^{-s}ds+e\int_0^\infty E(t+\tau s)e^{-s}ds. \tag{XXIII.65}$$

Usando la fórmula

$$\int_0^\infty s^n e^{-s}ds=n! \tag{XXIII.66}$$

queda finalmente

$$m\ddot{x}=f\left(x\right)+\tau\dot{x}\frac{df\left(x\right)}{dx}+e\int_0^\infty E(t+\tau s)e^{-s}ds. \tag{XXIII.67}$$

El efecto neto de todas estas transformaciones es doble. Por un lado, la reacción de radiación con su extraña (y acausal) dependencia en $\dddot{x}$ ha quedado sustituida por una fuerza de fricción $\tau\dot{x}f'$, en general dependiente de la posición, y que no conlleva problemas conceptuales. Por otro lado, la fuerza eléctrica $eE(t)$ ha quedado sustituida por la expresión integral dada arriba, que equivale a una convolución de ella con el factor de peso e^{-s}, o, si se desea, a un promedio a tiempos avanzados con tal factor de peso. Pese a las dificultades con la causalidad, es conveniente dejar así esta expresión, pues ayuda a reducir problemas de divergencia de ciertas integrales que encontraremos más adelante y que se agravan con la pura sustitución $\dddot{x}\to\tau\dot{x}f'$.

En el caso particular del oscilador (XXIII.55), la expresión(XXIII.67) da

$$\ddot{x}+\omega_0^2x+\tau\omega_0^2\dot{x}=\frac{e}{m}\int_0^\infty E(t+\tau s)e^{-s}ds. \tag{XXIII.68}$$

La parte estacionaria de la solución de esta ecuación integro-diferencial puede encontrarse fácilmente pasando al espacio de Fourier, para lo que escribimos

$$x(t) = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{x}(\omega) e^{i\omega t} d\omega, \tag{XXIII.69}$$

$$E(t) = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{E}(\omega) e^{i\omega t} d\omega. \tag{XXIII.70}$$

Sustituyendo estas expresiones en (XXIII.68), queda

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\omega^2 + \omega_0^2 + i\tau\omega_0^2\omega\right) \tilde{x}\left(\omega\right) e^{i\omega t} d\omega & \\ = \frac{e}{m\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \tilde{E}(\omega) e^{-s} e^{i\omega(t+\tau s)} d\omega ds & \\ = \frac{e}{m\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{E}(\omega)}{1 - i\tau\omega} e^{i\omega t} d\omega. & \end{aligned} \tag{XXIII.71}$$

Puesto que esta expresión debe valer para toda t, tenemos que

$$\tilde{x}\left(\omega\right) = \frac{e}{m} \frac{\tilde{E}(\omega)}{\left(1 - i\tau\omega\right)\left(-\omega^2 + \omega_0^2 + i\tau\omega_0^2\omega\right)}. \tag{XXIII.72}$$

Insertando este resultado en (XXIII.69) se obtiene

$$x\left(t\right) = \frac{e}{m\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{E}(\omega) e^{i\omega t}}{\left(1 - i\tau\omega\right)\left(-\omega^2 + \omega_0^2 + i\tau\omega_0^2\omega\right)} d\omega. \tag{XXIII.73}$$

Salvo cambios en la notación y modificaciones en la forma de escribir el denominador, que son válidas hasta términos de orden τ, ésta es la ecuación (T23.12) que había que demostrar.

La solución general se obtiene agregando a la solución estacionaria la solución general de la ecuación homogénea asociada a (XXIII.68), es decir,

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \tau\omega_0^2 \dot{x} = 0; \tag{XXIII.74}$$

esta solución es

$$x_{\text{trans}} = \left(x_1 e^{i\omega_1 t} + x_2 e^{-i\omega_1 t}\right) e^{-\gamma t}, \quad \omega_1 = \omega_0 \sqrt{1 - \tau^2\omega_0^2/4} \simeq \omega_0, \quad \gamma = \frac{1}{2}\tau\omega_0^2. \tag{XXIII.75}$$

El factor exponencial $e^{-\gamma t}$ garantiza que la contribución independiente del campo x_{trans} desaparece con el tiempo, por lo que para tiempos suficientemente largos (específicamente, mayores que $\gamma^{-1} = 2/\tau\omega_0^2$), la solución completa está dada por (XXIII.73), o sea, queda determinada por el campo de punto cero y es independiente de las condiciones iniciales.

XXIII.5 Derive detalladamente a partir de las ecuaciones (T23.14) y (T23.15) la función de autocorrelación y la variancia de $x(t)$ para el oscilador armónico estacionario.

La función de autocorrelación se escribe de inmediato usando (XXIII.73):

$$\begin{aligned}\left\langle x(t')x(t)\right\rangle &= \frac{e^2}{2\pi m^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\left\langle \tilde{E}\left(\omega'\right)\tilde{E}\left(\omega''\right)\right\rangle e^{i\omega' t'}}{\left(1-i\tau\omega'\right)\left(-\omega'^2+\omega_0^2+i\tau\omega_0^2\omega'\right)}\\ &\quad\times\frac{e^{i\omega'' t}}{\left(1-i\tau\omega''\right)\left(-\omega''^2+\omega_0^2+i\tau\omega_0^2\omega''\right)}d\omega''d\omega'\\ &= \frac{e^2}{2\pi m^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\left\langle \tilde{E}\left(\omega'\right)\tilde{E}^*(\omega)\right\rangle e^{i\omega' t'}}{\left(1-i\tau\omega'\right)\left(-\omega'^2+\omega_0^2+i\tau\omega_0^2\omega'\right)}\\ &\quad\times\frac{e^{-i\omega t}}{\left(1+i\tau\omega\right)\left(-\omega^2+\omega_0^2-i\tau\omega_0^2\omega\right)}d\omega d\omega', \qquad \text{(XXIII.76)}\end{aligned}$$

donde se hizo el cambio de variable $\omega'' = -\omega$. Insertamos aquí la expresión (XXIII.54) (o (T23.10)) para obtener

$$\begin{aligned}\left\langle x(t')x(t)\right\rangle &= \frac{2\pi e^2}{3m^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\rho_0(\omega)\delta(\omega-\omega')e^{i\omega' t'}}{\left(1-i\tau\omega'\right)\left(-\omega'^2+\omega_0^2+i\tau\omega_0^2\omega'\right)}\\ &\quad\times\frac{e^{-i\omega t}}{(1+i\tau\omega)(-\omega^2+\omega_0^2-i\tau\omega_0^2\omega)}d\omega d\omega' \qquad \text{(XXIII.77)}\\ &= \frac{2\pi e^2}{3m^2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\rho_0\left(\omega\right)e^{i\omega(t'-t)}\,d\omega}{\left(1+\tau^2\omega^2\right)\left|-\omega^2+\omega_0^2-i\tau\omega_0^2\omega\right|^2}. \qquad \text{(XXIII.78)}\end{aligned}$$

Sustituyendo (XXIII.1) para la densidad espectral obtenemos

$$\left\langle x\left(t'\right)x\left(t\right)\right\rangle = \frac{\hbar e^2}{3\pi m^2c^3}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{|\omega|^3\,e^{i\omega(t'-t)}d\omega}{\left(1+\tau^2\omega^2\right)\left[\left(\omega_0^2-\omega^2\right)^2+\tau^2\omega_0^4\omega^2\right]}, \qquad \text{(XXIII.79)}$$

que equivale a la ecuación (T23.14).

Con $t' = t$ obtenemos una expresión integral para la variancia de x:

$$\left\langle x^2\left(t\right)\right\rangle = \frac{2\hbar e^2}{3\pi m^2c^3}\int_0^{\infty}\frac{|\omega|^3\,d\omega}{\left(1+\tau^2\omega^2\right)\left[\left(\omega_0^2-\omega^2\right)^2+\tau^2\omega_0^4\omega^2\right]}. \qquad \text{(XXIII.80)}$$

Estos resultados muestran que la pequeñez del producto $\tau\omega$ para todas las frecuencias de interés físico da lugar a una resonancia extremamente aguda alrededor de la frecuencia $\omega = \omega_0$. Lo agudo de la curva de resonancia permite sustituir en el integrando la variable ω por ω_0 sin afectar apreciablemente su valor, salvo en los lugares donde aparece la diferencia $\omega - \omega_0$; en otras palabras, con el cambio de variable $z\omega_0 = \omega - \omega_0$ se puede escribir:

$$\left(\omega_0^2-\omega^2\right)^2 = \left(\omega_0+\omega\right)^2\left(\omega_0-\omega\right)^2 \approx 4\omega_0^4z^2, \qquad \text{(XXIII.81)}$$

y se obtiene

$$\begin{aligned}\left\langle x^2(t)\right\rangle &= \frac{2\hbar e^2}{3\pi m^2c^3}\cdot\frac{1}{4}\int_{-1}^{\infty}\frac{dz}{z^2+\frac{1}{4}\tau^2\omega_0^2}\\ &\simeq \frac{2\hbar e^2}{3\pi m^2c^3}\cdot\frac{1}{4}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dz}{z^2+\frac{1}{4}\tau^2\omega_0^2}\\ &= \frac{\hbar\tau}{\pi m}\cdot\frac{\pi}{2\tau\omega_0}, \qquad \text{(XXIII.82)}\end{aligned}$$

o, finalmente

$$\left\langle x^2\left(t\right)\right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_0}. \tag{XXIII.83}$$

Al pasar de la segunda a la tercera igualdad se extendió el límite inferior desde -1 hasta ∞, lo que no altera significativamente el resultado, que está dado por la resonancia en $\omega = \omega_0$ ($z = 0$).

Es conveniente aprovechar la oportunidad para agregar algunos comentarios, aunque ello signifique salirse un tanto del límite del problema planteado. El resultado (XXIII.83) puede ser obtenido de manera más simple y directa usando los resultados del problema XXIII.1, si se acepta que el sistema posee algunas propiedades ergódicas. Para el oscilador se escribió en dicho problema $x = a\cos\omega t$, de donde sigue para el promedio*temporal* del cuadrado $\overline{x^2} = a^2\overline{\cos^2\omega t} = {}^1\!/_2 a^2$. Sustituyendo aquí el valor de a^2 dado por (XXIII.4) y la energía media dada por (XXIII.20) se obtiene

$$\overline{x^2} = \frac{\bar{E}}{m\omega^2} = \frac{\hbar}{2m\omega}. \tag{XXIII.84}$$

La diferencia entre (XXIII.83) y (XXIII.84) consiste en que en la primera de estas ecuaciones el promedio se realiza sobre las diversas realizaciones del campo, mientras que en la segunda, dada una realización específica, se promedia sobre el tiempo. Ambos promedios arrojan resultados iguales, lo que muestra que el sistema posee al menos algunas propiedades ergódicas; si se postula que $\overline{x^2} = \left\langle x^2(t)\right\rangle$, el presente cálculo equivale a una derivación alterna de la variancia $\sigma_x^2 = \left\langle x^2(t)\right\rangle$.

Para completar la discusión, consideremos una vez más la ecuación (XXIII.78)

$$\left\langle x\left(t'\right)x\left(t\right)\right\rangle = \frac{4\pi e^2}{3m^2}\int_0^\infty \frac{\rho_0\left(\omega\right)e^{i\omega(t'-t)}\,d\omega}{\left(1+\tau^2\omega^2\right)\left|-\omega^2+\omega_0^2-i\tau\omega_0^2\omega\right|^2}. \tag{XXIII.85}$$

A muy altas frecuencias y para $t = t'$ el integrando se reduce a $\rho_0(\omega)/\tau^2\omega^6 \sim \omega^{-3}$, por lo que la contribución a la integral decae como $1/\omega^2$, y, aunque esta cola es muy extensa, su contribución resulta finita. Para lograr esta convergencia fue esencial el factor $1+\tau^2\omega^2$ que proviene de mantener la integral del campo $\int_0^\infty E(t+\tau s)e^{-s}ds$ en la ecuación de movimiento, pues es ella la que proporciona este factor. Sin embargo, el problema está lejos de haberse resuelto, pues si, por ejemplo, en vez de la autocorrelación de posiciones deseáramos calcular la de velocidades, deberemos escribir

$$\left\langle \dot{x}\left(t'\right)\dot{x}\left(t\right)\right\rangle = \frac{4\pi e^2}{3m^2}\int_0^\infty \frac{\omega^2\rho_0\left(\omega\right)e^{i\omega(t'-t)}\,d\omega}{\left(1+\tau^2\omega^2\right)\left|-\omega^2+\omega_0^2-i\tau\omega_0^2\omega\right|^2}. \tag{XXIII.86}$$

Esta vez el integrando tiene la forma $\omega^2\rho_0(\omega)/\tau^2\omega^6 \sim \omega^{-1}$ para altas frecuencias y $t = t'$, y la integral diverge logarítmicamente en el infinito. Puesto que la energía de la partícula es finita, también debe serlo $\left\langle \dot{x}^2(t)\right\rangle$; en consecuencia, la divergencia es afísica. Éste es un ejemplo de las divergencias que típicamente se encuentran asociadas al campo de punto cero, cuya densidad espectral $\sim \omega^3$ dada por la ecuación (XXIII.1) no es integrable. Divergencias similares se encuentran en general en las teorías cuánticas de campo, aunque no todas ellas están asociadas a la causa que aquí se analiza. De los diversos procedimientos para regularizar estas integrales, es decir, para asignarles un valor finito y físicamente sensato, el

más simple consiste en agregar al integrando un factor de convergencia, que se mantiene prácticamente igual a 1 para todas las frecuencias de interés físico, pero que se anula rápidamente a frecuencias mayores. De esta manera se logra que la cola se colapse en la región en que no es físicamente significativa. Una prueba de la confiabilidad del resultado alcanzado en una aplicación dada es que debe ser esencialmente insensible a los detalles del corte, pues el resultado físico no debe depender de él. Más formalmente, se exige que los resultados físicos sean finitos e independientes del o de los parámetros de corte cuando se les hace tender al infinito.

XXIII.6 Demuestre que las definiciones usadas en la electrodinámica estocástica dan para la dispersión de la energía del estado base del oscilador armónico el valor $\sigma_H^2 = E_0^2$.

En la sección 23.4 del texto se demuestra, utilizando métodos estocásticos, que la densidad espacial para el oscilador armónico corresponde a una distribución normal con valor medio nulo y variancia $\sigma_x^2 = \hbar/2m\omega_0$, esto es,

$$\rho\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right) = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega_0 x^2}{\hbar}\right), \qquad \text{(XXIII.87)}$$

resultado que coincide con el caso cuántico para el estado base. De forma similar, la densidad de partículas en el espacio momental resulta también gaussiana, con valor medio nulo y variancia $\sigma_p^2 = \frac{1}{2}m\hbar\omega_0$, o sea

$$\rho_p\left(p\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_p^2}} \exp\left(-\frac{p^2}{2\sigma_p^2}\right) = \sqrt{\frac{1}{\pi m\hbar\omega_0}} \exp\left(-\frac{p^2}{m\hbar\omega_0}\right), \qquad \text{(XXIII.88)}$$

que también corresponde a las predicciones cuánticas para el mismo estado base.

De estos resultados sigue de inmediato que

$$\left\langle x^4(t)\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^4 \rho(x) dx = 3\sigma_x^4 = \frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{m^2\omega_0^2}, \qquad \text{(XXIII.89)}$$

$$\left\langle p^4(t)\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p^4 \rho_p(p) dp = 3\sigma_p^4 = \frac{3}{4}m^2\hbar^2\omega_0^2. \qquad \text{(XXIII.90)}$$

A su vez, la energía media del estado estacionario (base) es

$$\begin{aligned} \langle H\rangle &= \left\langle \frac{p^2}{2m} + \tfrac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 \right\rangle = \frac{\sigma_p^2}{2m} + \tfrac{1}{2}m\omega_0^2\sigma_x^2 \\ &= \tfrac{1}{4}\hbar\omega_0 + \tfrac{1}{4}\hbar\omega_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0, \end{aligned} \qquad \text{(XXIII.91)}$$

en coincidencia con la mecánica cuántica. Sin embargo, tratándose de variables estocásticas reales, en la presente teoría se obtiene (las variables x y p están descorrelacionadas)

$$\begin{aligned} \left\langle H^2\right\rangle &= \left\langle \frac{p^4}{4m^2} + \tfrac{1}{2}\omega_0^2 x^2 p^2 + \tfrac{1}{4}m^2\omega_0^4 x^4 \right\rangle \\ &= \tfrac{3}{16}\hbar^2\omega_0^2 + \tfrac{1}{8}\hbar^2\omega_0^2 + \tfrac{3}{16}\hbar^2\omega_0^2 = \tfrac{1}{2}\hbar^2\omega_0^2 = 2\left\langle H\right\rangle^2, \end{aligned} \qquad \text{(XXIII.92)}$$

con lo cual la dispersión de la energía resulta

$$\sigma_E^2 = \left\langle H^2 \right\rangle - \langle H \rangle^2 = \langle H \rangle^2 \,, \tag{XXIII.93}$$

o sea

$$\sigma_E^2 = E_0^2, \tag{XXIII.94}$$

como se quería demostrar. El correspondiente valor cuántico es $\sigma_E^2 = 0$, pues se trata de un eigenestado del hamiltoniano. Este tipo de discrepancias entre ambas teorías es general: en la teoría estocástica los estados estacionarios tienen necesariamente una distribución de energías, no una energía fija. Debe observarse, sin embargo, que las cantidades σ_E^2 y $< (\Delta \hat{H})^2 >_{\text{cuántico}} \equiv \langle \psi_0 \mid \hat{H}^2 - E^2 \mid \psi_0 \rangle$ son conceptualmente diferentes, por lo que no sorprende que sus valores sean diferentes; lo que hay que evitar es confundirlas. Para aclarar este punto, basta que tomemos en cuenta que en el cálculo de σ_E^2 se utiliza la distribución en el espacio fase, mientras que para evaluar el resultado cuántico se determinan valores esperados de operadores en el espacio de Hilbert. Si, por lo contrario, se evalúa σ_E^2 dentro de la propia mecánica cuántica, pero utilizando para este propósito la distribución de Wigner,[4] se recupera precisamente el resultado (XXIII.94), y con ello la concordancia entre ambas teorías. La razón de esto reside en el hecho de que la distribución de Wigner y la predicha por la electrodinámica estocástica para el presente problema coinciden, por lo que todos los momentos predichos por ambas teorías se corresponden, y no sólo los dos primeros.

XXIII.7 Calcule la energía media del sistema de osciladores descrito por la densidad de equilibrio (T23.27) y demuestre que las energías E_n de la ecuación (T23.29) están dadas por la fórmula cuántica $E_n = E_0(2n + 1)$.

La densidad espectral que describe osciladores mecánicos, en equilibrio con el campo de radiación a temperatura arbitraria $T > 0$, está dada por la ecuación (T23.27)

$$\rho\,(x;T) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar \coth z}}\, e^{-(m\omega/\hbar)x^2 \tanh z}, \quad z = \beta E_0 = \frac{\hbar\omega}{2k_B T}. \tag{XXIII.95}$$

La variancia de esta distribución normal (que ya está debidamente normalizada a la unidad, $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x;T)\, dx = 1$) se puede escribir directamente por comparación con la fórmula general de la distribución normal dada por la ecuación (II.23),

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} e^{-(x-\bar{x})^2/2\sigma_x^2}, \tag{XXIII.96}$$

y es

$$\sigma_{x(T)}^2 = \left\langle x^2(T) \right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \coth z = \left\langle x_0^2 \right\rangle \coth z = \left\langle x_0^2 \right\rangle \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T}, \tag{XXIII.97}$$

donde $\left\langle x_0^2 \right\rangle = \hbar/2m\omega$ está dado por (XXIII.83) y corresponde a la dispersión de x para el estado base.

La energía media de los osciladores se obtiene de inmediato haciendo uso del teorema del virial, del que sigue

$$\bar{E} = 2\bar{V} = m\omega^2 \left\langle x^2(T) \right\rangle = E_0 \coth z. \tag{XXIII.98}$$

[4] La distribución de Wigner se estudia someramente en el problema ilustrativo 21.8 del texto.

Para determinar los valores de E_n podemos proceder como sigue: Reescribimos $\bar{E}$ en la forma

$$\bar{E} = E_0 \frac{e^z + e^{-z}}{e^z - e^{-z}} = E_0 \frac{1 + e^{-2z}}{1 - e^{-2z}} = \frac{E_0}{Z} e^{-z} \frac{1 + e^{-2z}}{(1 - e^{-2z})^2}, \tag{XXIII.99}$$

donde Z es la función de partición, dada por la ecuación (T21.69)

$$Z = \frac{1}{2 \operatorname{senh} z} = \frac{e^{-z}}{1 - e^{-2z}}. \tag{XXIII.100}$$

Para proseguir reescribimos (XXIII.99) en la forma

$$\bar{E} = \frac{1}{Z} E_0 e^{-z} \frac{1 - e^{-2z} + 2e^{-2z}}{(1 - e^{-2z})^2} = \frac{1}{Z} E_0 e^{-z} \left[\frac{1}{1 - e^{-2z}} + \frac{2e^{-2z}}{(1 - e^{-2z})^2} \right]. \tag{XXIII.101}$$

El primer término del paréntesis puede desarrollarse en serie de potencias del exponencial como

$$\frac{1}{1 - e^{-2z}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-2zn}, \tag{XXIII.102}$$

mientras que la derivada respecto de z de esta relación reproduce el segundo término,

$$-\frac{d}{dz} \frac{1}{1 - e^{-2z}} = \frac{2e^{-2z}}{(1 - e^{-2z})^2} = \sum_{n=0}^{\infty} 2n e^{-2zn}. \tag{XXIII.103}$$

Sustituyendo en (XXIII.101) se obtiene

$$\bar{E} = \frac{1}{Z} e^{-z} \left[\sum_{n=0}^{\infty} E_0 e^{-2zn} + \sum_{n=0}^{\infty} E_0 2n e^{-2zn} \right],$$

o sea

$$\bar{E} = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} E_0 \left(2n + 1\right) e^{-(2n+1)E_0\beta}. \tag{XXIII.104}$$

Comparando este resultado con la expresión canónica

$$\bar{E} = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-E_n\beta} \tag{XXIII.105}$$

se obtiene de inmediato

$$E_n = E_0(2n + 1). \tag{XXIII.106}$$

XXIII.8 Demuestre que $\int_{-\infty}^{\infty} \left(2A\boldsymbol{\nabla}A \cdot \boldsymbol{\nabla}S + A^2\boldsymbol{\nabla}^2 S\right) dx = 0$ para A y S reales que se anulan suficientemente rápido en el infinito, y que esta igualdad equivale en general a $\langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + (\hbar/2m)\nabla \cdot \mathbf{v} \rangle = 0$, donde $\mathbf{u}$ y $\mathbf{v}$ son las velocidades estocástica y sistemática introducidas en el problema ilustrativo 23.1 del texto.

Con ayuda de la identidad

$$2A\boldsymbol{\nabla}A \cdot \boldsymbol{\nabla}S + A^2\boldsymbol{\nabla}^2 S = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(A^2 \boldsymbol{\nabla} S\right) \tag{XXIII.107}$$

podemos escribir

$$\int \left(2A\boldsymbol{\nabla}A\cdot\boldsymbol{\nabla}S+A^2\boldsymbol{\nabla}^2S\right)dx=\int\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(A^2\boldsymbol{\nabla}S\right)dx=0, \tag{XXIII.108}$$

donde hemos utilizado el teorema de Gauss y el hecho de que $A^2\boldsymbol{\nabla}S$ se anula en el infinito por hipótesis.

Para conectar con la descripción estocástica escribimos la función de onda en la forma $\psi=Re^{iS}$, con lo que las velocidades sistemática y estocástica toman la forma

$$\mathbf{v}=\frac{\hbar}{m}\nabla S,\quad \mathbf{u}=\frac{\hbar}{2m}\frac{\nabla\rho}{\rho}=\frac{\hbar}{m}\frac{\nabla R}{R}. \tag{XXIII.109}$$

De aquí se obtiene

$$\begin{aligned}\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle &= -i\hbar\int\psi^*\nabla\psi\,dx=-im\int\psi^*\left(\frac{\hbar}{m}\frac{1}{R}\nabla R+i\frac{\hbar}{m}\nabla S\right)\psi\,dx\\ &= -im\int\psi^*\left(\mathbf{u}+i\mathbf{v}\right)\psi\,dx,\end{aligned} \tag{XXIII.110}$$

o sea

$$\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle=m\left\langle\mathbf{v}-i\mathbf{u}\right\rangle. \tag{XXIII.111}$$

Este resultado muestra que tanto la parte real como la imaginaria del valor medio del operador $\hat{\mathbf{p}}$ tienen significado físico, dando la primera el momento medio asociado al flujo sistemático de las partículas, mientras que la segunda se refiere al flujo asociado a los procesos difusivos.

Como se muestra en el problema ilustrativo 23.1 del texto, se tiene también que

$$\begin{aligned}\left\langle\hat{\mathbf{p}}^2\right\rangle &= -\hbar^2\int\psi^*\nabla^2\psi\,dx\\ &= -\hbar^2\int\left[R\boldsymbol{\nabla}^2R-R^2\left(\boldsymbol{\nabla}S\right)^2+i\left(2R\boldsymbol{\nabla}R\cdot\boldsymbol{\nabla}S+R^2\boldsymbol{\nabla}^2S\right)\right]dx.\end{aligned} \tag{XXIII.112}$$

Aplicando (XXIII.108) con $A\to R$ se obtiene

$$\int\left(2R\boldsymbol{\nabla}R\cdot\boldsymbol{\nabla}S+R^2\boldsymbol{\nabla}^2S\right)dx=0, \tag{XXIII.113}$$

con lo que (XXIII.110) se reduce a

$$\left\langle\hat{\mathbf{p}}^2\right\rangle=-\hbar^2\int\left[R\boldsymbol{\nabla}^2R-R^2\left(\boldsymbol{\nabla}S\right)^2\right]dx. \tag{XXIII.114}$$

En términos de las velocidades, las dos últimas expresiones dan

$$\int\rho\left(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}+\frac{\hbar}{2m}\nabla\cdot\mathbf{v}\right)dx=0, \tag{XXIII.115}$$

$$\left\langle\hat{\mathbf{p}}^2\right\rangle=m^2\int\rho\left(\mathbf{v}^2-\mathbf{u}^2-\frac{\hbar}{m}\nabla\cdot\mathbf{u}\right)dx. \tag{XXIII.116}$$

La ecuación (XXIII.115) es el resultado solicitado. En estas expresiones se ha hecho la identificación

$$\rho=\psi^*\psi=R^2. \tag{XXIII.117}$$

Es interesante observar que la ecuación (XXIII.116) admite una forma más transparente, la que se obtiene empleando el procedimiento sugerido en el problema ilustrativo 23.1 del texto. Mediante una integración por partes y usando (XXIII.109), escribimos

$$\int R\boldsymbol{\nabla}^2 R dx = -\int (\nabla R)^2 \, dx = -\int \rho \frac{(\nabla R)^2}{R^2} dx = -\left\langle \left(\frac{\boldsymbol{\nabla} R}{R} \right)^2 \right\rangle = -\frac{m^2}{\hbar^2} \left\langle \mathbf{u}^2 \right\rangle . \tag{XXIII.118}$$

Sustituyendo en (XXIII.114) se obtiene

$$\left\langle \hat{\mathbf{p}}^2 \right\rangle = m^2 \int \left(\mathbf{v}^2 + \mathbf{u}^2 \right) \rho dx = m^2 \left\langle \mathbf{v}^2 + \mathbf{u}^2 \right\rangle . \tag{XXIII.119}$$

Las ecuaciones (XXIII.116) y (XXIII.119) muestran que la energía media asociada a los procesos difusivos cuánticos puede escribirse indistintamente en las formas

$$\bar{T}_{\mathbf{u}} = \tfrac{1}{2} m \left\langle \mathbf{u}^2 \right\rangle = -\tfrac{1}{2} m \left\langle \mathbf{u}^2 + \frac{\hbar}{m} \nabla \cdot \mathbf{u} \right\rangle = -\frac{\hbar}{2} \left\langle \nabla \cdot \mathbf{u} \right\rangle . \tag{XXIII.120}$$

Finalmente, observamos que la ecuación (XXIII.115), $\langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + (\hbar/2m) \nabla \cdot \mathbf{v} \rangle = 0$, es consecuencia directa de la ecuación de continuidad y, por lo tanto, tiene este significado. En efecto, con ayuda de (XXIII.109) se puede escribir

$$\frac{\hbar}{2m} \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = \frac{\hbar}{2m} \rho \nabla \cdot \mathbf{v} + \frac{\hbar}{2m} \mathbf{v} \cdot \nabla \rho = \left(\frac{\hbar}{2m} \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \right) \rho = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial \rho}{\partial t}, \tag{XXIII.121}$$

donde la última igualdad proviene de la ecuación de continuidad. Por lo tanto, (XXIII.115) equivale a escribir

$$\int \frac{\partial \rho}{\partial t} dx = \frac{d}{dt} \int \rho dx = 0, \tag{XXIII.122}$$

resultado inmediato cuando la evolución preserva la probabilidad.

XXIII.2. Problemas adicionales

XXIII.9 Considere un flujo de partículas con velocidad local $v(x)$ que se conserva; se agrega al sistema un proceso difusivo que transforma la ecuación de continuidad en una ecuación de difusión, con término difusivo $D\nabla^2\rho$,[5] pero cuya presencia no altera la ecuación de continuidad. Utilice estas condiciones para derivar la fórmula (XXIII.109) introducida en el problema ilustrativo 23.1 del texto

$$\mathbf{u} = \frac{\hbar}{2m} \frac{\nabla \rho}{\rho}$$

y para mostrar que el coeficiente de difusión D debe tomarse como $\hbar/2m$.

[5]El término difusivo es estándar en la teoría de procesos brownianos. Como referencia puede verse, por ejemplo, N.G. van Kampen,*Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, 1981).

Partimos de la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0. \tag{XXIII.123}$$

Puesto que esta ecuación debe mantenerse en vigor aun después de agregar el término difusivo $D\nabla^2\rho$, la reescribimos en la forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} + D\nabla^2\rho = D\nabla^2\rho, \tag{XXIII.124}$$

donde el miembro derecho describe el efecto de la difusión; el término agregado al lado izquierdo para mantener la validez de (XXIII.123) debe interpretarse como una contribución al flujo local de partículas generada por los procesos difusivos. Para hacer esto lo reescribimos en una forma similar a la del término asociado al flujo sistemático en (XXIII.124), $\nabla \cdot \rho \mathbf{v}$:

$$D\nabla^2\rho = D\nabla \cdot \nabla\rho = \nabla \cdot \left(D\rho \frac{\nabla \rho}{\rho} \right) \equiv \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}), \tag{XXIII.125}$$

con

$$\mathbf{u} = D\frac{\nabla \rho}{\rho}. \tag{XXIII.126}$$

La comparación de (XXIII.109) y (XXIII.126) muestra que debe tomarse $D = \hbar/2m$. De esta manera, la ecuación (*de Fokker-Planck hacia adelante*) (XXIII.124) puede reescribirse en la forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{c} = D\nabla^2\rho, \tag{XXIII.127}$$

donde se ha introducido la velocidad local total (hacia adelante)

$$\mathbf{c} = \mathbf{v} + \mathbf{u}. \tag{XXIII.128}$$

XXIII.10 Analice el significado del orden de los operadores $\hat{x}$ y $\hat{p}$ desde el punto de vista de la mecánica cuántica estocástica discutida en el problema ilustrativo 23.1 del texto.

Mediante una integración por partes puede escribirse

$$\begin{aligned} \int \psi^* \left(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \right) \psi dx &= -i\hbar \int \psi^* \left(x\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} x\psi \right) dx \\ &= -i\hbar \int x \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx \\ &= 2m \int xv\rho dx = 2m \langle xv \rangle , \end{aligned} \tag{XXIII.129}$$

donde se hizo uso de (XXIII.117) y de (XXIII.109) para escribir la velocidad sistemática en la forma

$$v = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{1}{\psi}\frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{1}{\psi^*}\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right). \tag{XXIII.130}$$

De esta forma se obtiene

$$\tfrac{1}{2} \langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle = m \langle xv \rangle . \tag{XXIII.131}$$

De manera análoga procedemos con el conmutador, para obtener

$$\begin{aligned}\int \psi^* \left(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}\right)\psi dx &= -i\hbar \int \psi^* \left(x\frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\psi\right) dx \\ &= i\hbar \int \psi^* \left(\frac{\partial x}{\partial x}\right)\psi dx = -i\hbar \int x\frac{\partial \rho}{\partial x}dx \\ &= -2im \int xu\rho dx = -2im\left\langle xu\right\rangle, \qquad \text{(XXIII.132)}\end{aligned}$$

es decir,

$$\tfrac{1}{2}\left\langle \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}\right\rangle = -im\left\langle xu\right\rangle. \qquad \text{(XXIII.133)}$$

Notamos incidentalmente que este resultado se puede escribir, usando $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, como

$$\left\langle xu\right\rangle = -\frac{\hbar}{2m}, \qquad \text{(XXIII.134)}$$

que muestra que la correlación $\langle xu\rangle$ toma en todos los casos el mismo valor $-\hbar/2m$; ésta es una forma alterna de enunciar la regla de cuantización $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

Combinando (XXIII.131) y (XXIII.133) se tiene

$$\frac{1}{m}\left\langle \hat{x}\hat{p}\right\rangle = \left\langle xv\right\rangle - i\left\langle xu\right\rangle = \left\langle x(v - iu)\right\rangle, \qquad \text{(XXIII.135)}$$

$$\frac{1}{m}\left\langle \hat{p}\hat{x}\right\rangle = \left\langle xv\right\rangle + i\left\langle xu\right\rangle = \left\langle x(v + iu)\right\rangle. \qquad \text{(XXIII.136)}$$

Vemos que los valores esperados $\langle\hat{x}\hat{p}\rangle$ y $\langle\hat{p}\hat{x}\rangle$ dan correlaciones de variables (complejas) diferentes, con $\langle\hat{x}\hat{p}\rangle = \langle\hat{p}\hat{x}\rangle^*$, es decir, que el cambio de orden es equivalente a la conjugación $v - iu \to (v - iu)^* = v + iu$. Desde esta perspectiva, es claro que el orden de los factores en el cálculo del valor esperado no tiene nada que ver con ningún ordenamiento (temporal) de mediciones u observaciones, sino que determina la variable cuya correlación se está calculando.

El resultado anterior es inmediatamente generalizable a cualquier pareja (o número) de operadores, lo que permite concluir que, en general, diferentes ordenamientos corresponden a correlaciones de diferentes variables (complejas).

XXIII.11 Demuestre de manera directa que las órbitas de un átomo "clásico" inmerso en el campo de radiación de punto cero son estables, cuando se consideran sólo órbitas circulares.

El cambio en la energía media del electrón atómico sujeto a la acción del campo de punto cero y de la reacción de radiación se puede escribir en la forma

$$\frac{d\bar{E}}{dt} = \bar{P}_{\text{abs}} - \bar{P}_{\text{rad}}. \qquad \text{(XXIII.137)}$$

El teorema del virial permite escribir la expresión aproximada

$$\frac{d\bar{E}}{dt} = \frac{1}{2}\frac{d\bar{V}}{dt} = \overline{\frac{e^2\dot{r}}{2r^2}}, \qquad \text{(XXIII.138)}$$

de manera que se obtiene

$$\bar{\dot{r}} = \frac{2\overline{r^2}}{e^2}\left(\bar{P}_{\text{abs}} - \bar{P}_{\text{rad}}\right). \qquad \text{(XXIII.139)}$$

Al escribir esta expresión se ha hecho la aproximación, válida sólo para órbitas muy cercanas a las circulares, $\overline{\dot{r}/r^2} \simeq \bar{\dot{r}}/\overline{r^2}$. Con esta misma aproximación, las potencias radiada y absorbida están dadas por las ecuaciones (XXIII.21) y (XXIII.22), por lo que podemos escribir

$$\bar{\dot{r}} = \frac{2\tau\overline{r^2}}{e^2}\left(\hbar\omega^3 - m_0\omega^4\overline{r^2}\right), \tag{XXIII.140}$$

donde ω representa la frecuencia circular del movimiento orbital, que para una órbita circular de Kepler se obtiene de la ecuación (XXIII.26), y está dada por

$$\omega^2 = \frac{e^2}{m_0 r^3}. \tag{XXIII.141}$$

Para escribir (XXIII.140) en la forma explícita dada se ha tomado en cuenta que el átomo se encuentra inmerso en el campo de punto cero, de tal manera que la densidad espectral que aparece en la expresión $\bar{P}_{\text{abs}} = 4\pi^2 e^2 \rho(\omega)/3m_0$ es proporcional a ω^3; como se verá de lo que sigue, esta suposición resulta decisiva. Con el objeto de simplificar aún más el tratamiento del problema, en lo que sigue consideraremos exclusivamente a las órbitas circulares, lo que permite reescribir (XXIII.140) como una ecuación diferencial para el radio orbital:

$$\dot{r} = \frac{2\tau r^2}{e^2}\left(\hbar\omega^3 - m_0\omega^4 r^2\right) = -\frac{2\tau e^2}{m_0 r^2}\left(1 - \sqrt{\frac{a_0}{r}}\right), \tag{XXIII.142}$$

donde a_0 es el radio de Bohr, $a_0 = \hbar^2/m_0 e^2$. Finalmente, la ecuación a resolver, escrita en unidades atómicas, es

$$\dot{r} = -\frac{2\alpha^3}{3r^2}\left(1 - \sqrt{\frac{1}{r}}\right). \tag{XXIII.143}$$

Esta ecuación se integra con procedimientos algebraicos usuales, haciendo el cambio de variable

$$r = (1+z)^2, \tag{XXIII.144}$$

que conduce a

$$\dot{z} = -\frac{\alpha^3}{3}\frac{z}{(1+z)^6}. \tag{XXIII.145}$$

Integrando se obtiene la solución implícita

$$\frac{\alpha^3}{3}t = \ln\frac{z_0}{z} + g(z_0) - g(z), \tag{XXIII.146}$$

en donde $z_0 = \sqrt{r_0} - 1$ es el valor inicial de z y se ha introducido la abreviación

$$g(z) = 6z + \tfrac{15}{2}z^2 + \tfrac{20}{3}z^3 + \tfrac{15}{4}z^4 + \tfrac{6}{5}z^5 + \tfrac{1}{6}z^6. \tag{XXIII.147}$$

Para estudiar el comportamiento predicho por esta solución es conveniente estudiar por separado algunos casos especialmente importantes.

a) Supongamos que la partícula se encuentra en una órbita con radio cercano al de Bohr, es decir, $r \approx 1$, y z es cercana a cero (positiva o negativa).

En este caso el término logarítmico del miembro derecho de (XXIII.146) es francamente dominante, y se puede aproximar

$$\frac{\alpha^3}{3}t = \ln\frac{z_0}{z} \quad \Rightarrow \quad z = z_0 e^{-(a^3/3)t}, \tag{XXIII.148}$$

que muestra que la órbita se acercará con rapidez a la órbita de Bohr, y queda establemente atrapada.

b) Si inicialmente la partícula se encuentra muy lejos del radio de Bohr, $r \gg 1$ y $z \gg 1$, para tiempos cortos se puede escribir

$$\frac{\alpha^3}{3}t = g(z_0) - g(z) \approx -g'(z_0)\,(z - z_0) \approx -z_0^5\,(z - z_0)\,, \tag{XXIII.149}$$

$$z = z_0 - \frac{\alpha^3}{3z_0^5}t. \tag{XXIII.150}$$

Por lo tanto, la tendencia de r en este caso es a disminuir con el tiempo, es decir, a acercarse a la órbita de Bohr. Un resultado enteramente análogo se obtiene para el caso $r \ll 1$; más en general, el estudio más detallado del comportamiento de $r(t)$ confirma los resultados anteriores y permite concluir que en cada caso el sistema tiende a estabilizarse alrededor de la órbita de Bohr.

Dos observaciones son importantes. La primera se refiere a la forma del espectro; es claro de los cálculos anteriores que si se modifica el espectro, el primer término del lado derecho de (XXIII.140) se modifica en consecuencia y la solución pierde en general las propiedades que se acaban de estudiar. Un ejercicio particularmente interesante consiste en considerar el caso de un ruido blanco, y convencerse que no conduce a órbitas estables. La segunda observación es que la consideración de sólo órbitas circulares, aunque parcialmente justificada por el hecho de que ellas son dominantes en el caso clásico (es decir, en ausencia del campo de punto cero), no es del todo correcta. De hecho, un análisis más detallado de este sistema, considerando todas las órbitas y el modelo más simple del campo de fondo —pero, naturalmente, con densidad espectral proporcional a ω^3—, conduce a resultados mucho menos que satisfactorios, al predecir autoionización del átomo. Es claro que la consideración de modelos más elaborados, como, por ejemplo, el que se estudia en el siguiente problema, puede ser la clave para la solución final de este importante problema.[6]

* **XXIII.12** En una variante de la electrodinámica estocástica, llamada electrodinámica estocástica lineal, se propone un principio que determina las propiedades de los sistemas cuánticos. Este principio establece que si la variable $x_\alpha(t)$ correspondiente a un estado α del sistema posee el desarrollo de Fourier

$$x_\alpha(t) = \sum_\beta \tilde{x}_{\alpha\beta} e^{-i\omega_{\alpha\beta}t} a_{\alpha\beta},$$

donde las $a_{\alpha\beta}$ son las amplitudes estocásticas del campo de fondo en equilibrio con el sistema material, entonces las frecuencias $\omega_{\alpha\beta}$ son cantidades no aleatorias.

[6] Mayores detalles sobre estos temas pueden encontrarse en el libro citado en la siguiente nota al pie.

Demuestre a través de la consideración de un ejemplo simple pero no lineal, que este principio transforma la ecuación de movimiento de la electrodinámica estocástica en ecuaciones que tienen la misma estructura que las de la mecánica matricial. Utilice, en particular, una fuerza de la forma $f(x) = ax + bx^2$.

Como ejemplo consideraremos el caso de una fuerza dada por

$$f(x) = -m\left(\omega_0^2 x + \gamma x^2\right). \tag{XXIII.151}$$

Si x admite el desarrollo de Fourier

$$x_\alpha(t) = \sum_\beta \tilde{x}_{\alpha\beta} e^{-i\omega_{\alpha\beta}t} a_{\alpha\beta}, \tag{XXIII.152}$$

el término no lineal de la fuerza toma la forma

$$\begin{aligned} -m\gamma x^2 &= -m\gamma \sum \tilde{x}_{\alpha\beta'}\tilde{x}_{\alpha''\beta''} e^{-i\left(\omega_{\alpha\beta'}+\omega_{\alpha''\beta''}\right)t} a_{\alpha\beta'}a_{\alpha''\beta''} \\ &= -m\gamma \sum_{\alpha\beta} \left(\tilde{x}_{\alpha\beta'}\tilde{x}_{\alpha''\beta''}\right)_{\alpha\beta} e^{-i\omega_{\alpha\beta}t} \left(a_{\alpha\beta'}a_{\alpha''\beta''}\right)_{\alpha\beta}. \end{aligned} \tag{XXIII.153}$$

Al escribir la última expresión se han reagrupado los diversos términos de las sumas, de tal manera que cada uno de los que aparecen en la última línea corresponde a la frecuencia $\omega_{\alpha\beta}$ (la que puede tomar cualquier valor, por el momento); éste es el significado del subíndice $\alpha\beta$ en los coeficientes. En particular, esto exige que se cumpla la siguiente condición sobre las posibles frecuencias participantes:

$$\omega_{\alpha\beta} = \omega_{\alpha\beta'} + \omega_{\alpha''\beta''}. \tag{XXIII.154}$$

Es claro que para términos que involucran potencias mayores de x se puede efectuar un procedimiento similar, sólo que conducirá a un mayor número de factores en ambos coeficientes de (XXIII.153) y de sumandos en (XXIII.154).

La ecuación de movimiento está dada por (XXIII.57), es decir,

$$\ddot{x} - \tau\, \dddot{x} + \omega_0^2 x + \gamma x^2 = \frac{e}{m} E(t). \tag{XXIII.155}$$

Hacemos una transformación de Fourier y agrupamos los términos que corresponden a la frecuencia $\omega_{\alpha\beta}$. Para que se satisfaga idénticamente la ecuación resultante, el coeficiente de cada uno de los factores de Fourier $e^{-i\omega_{\alpha\beta}t}$ debe anularse. Se obtiene de esta manera, con $\tilde{E}(\omega_{\alpha\beta})a_{\alpha\beta}$ la respectiva amplitud de Fourier del campo,

$$\begin{aligned} &\left(-\omega_{\alpha\beta}^2 + i\tau\omega_{\alpha\beta}^3 + \omega_0^2\right)\tilde{x}_{\alpha\beta}a_{\alpha\beta} \\ &\qquad + \gamma \sum \left(\tilde{x}_{\alpha\beta'}\tilde{x}_{\alpha''\beta''}\right)_{\alpha\beta} \left(a_{\alpha\beta'}a_{\alpha''\beta''}\right)_{\alpha\beta} = \frac{e}{m}\tilde{E}(\omega_{\alpha\beta})a_{\alpha\beta}. \end{aligned} \tag{XXIII.156}$$

Este conjunto de ecuaciones algebraicas determina tanto las amplitudes $\tilde{x}_{\alpha\beta}$ como las frecuencias $\omega_{\alpha\beta}$ de las posibles soluciones. Sin embargo, puesto que estas ecuaciones dependen de las amplitudes estocásticas del campo $a_{\mu v}$, sus soluciones son variables estocásticas. El principio que establece que las soluciones de interés son no aleatorias obliga a exigir que se cumpla la condición

$$\left(a_{\alpha\beta'}a_{\alpha'\beta''}\right)_{\alpha\beta} = a_{\alpha\beta}, \tag{XXIII.157}$$

pues con ella la ecuación (XXIII.156) se transforma en

$$\left(-\omega_{\alpha\beta}^2 + i\tau\omega_{\alpha\beta}^3 + \omega_0^2\right)\tilde{x}_{\alpha\beta} + \gamma\sum\left(\tilde{x}_{\alpha\beta'}\tilde{x}_{\alpha''\beta''}\right)_{\alpha\beta} = \frac{e}{m}\tilde{E}(\omega_{\alpha\beta}), \qquad \text{(XXIII.158)}$$

donde no aparece ya ningún elemento estocástico y, por lo tanto, sus soluciones (y, en particular las frecuencias características $\omega_{\alpha\beta}$) son cantidades no aleatorias.

La manera de resolver el problema ejemplificado con la condición (XXIII.157) es considerar que las amplitudes relevantes del campo de fondo en equilibrio con el sistema se pueden expresar en la forma

$$a_{\alpha\beta} = e^{i\left(\varphi_\alpha - \varphi_\beta\right)}; \qquad \text{(XXIII.159)}$$

las fases al azar φ_α y φ_β son estadísticamente independientes y están uniformemente distribuidas en $[0, 2\pi]$. Con esto se tiene, por ejemplo, que debe ponerse

$$\left(a_{\alpha\beta'}a_{\alpha'\beta''}\right)_{\alpha\beta} = a_{\alpha\beta'}a_{\beta'\beta} = e^{i\left(\varphi_\alpha - \varphi_{\beta'}\right)}e^{i\left(\varphi_{\beta'} - \varphi_\beta\right)} = e^{i\left(\varphi_\alpha - \varphi_\beta\right)} = a_{\alpha\beta}, \qquad \text{(XXIII.160)}$$

tal como exige la condición (XXIII.157). Es claro que el mismo mecanismo opera para cualquier número de factores. Cuando se aplica esta regla (que debe considerarse que describe las propiedades adquiridas por el campo debido a su interacción con el sistema atómico, alcanzadas sólo hasta que se establece una condición suficientemente cercana al equilibrio) a las amplitudes $\tilde{x}_{\alpha\beta}$, se observa que éstas se multiplican siguiendo las reglas del producto de matrices. Por ejemplo,[7]

$$\left(\tilde{x}_{\alpha\beta'}\tilde{x}_{\alpha''\beta''}\right)_{\alpha\beta} = \sum_\beta \tilde{x}_{\alpha\beta'}\tilde{x}_{\beta'\beta} = \sum_\beta \widetilde{(x^2)}_{\alpha\beta}. \qquad \text{(XXIII.161)}$$

Con esta observación, la ecuación (XXIII.158) puede leerse en términos matriciales y reescribirse en la forma

$$m\left(-\omega_{\alpha\beta}^2 + i\tau\omega_{\alpha\beta}^3\right)\tilde{x}_{\alpha\beta} - \left(\widetilde{f(x)}\right)_{\alpha\beta} = e\tilde{E}(\omega_{\alpha\beta}). \qquad \text{(XXIII.162)}$$

Conviene introducir ahora los elementos dependientes del tiempo

$$\tilde{x}_{\alpha\beta}(t) = \tilde{x}_{\alpha\beta}e^{-i\omega_{\alpha\beta}t}, \quad \tilde{E}_{\alpha\beta}(t) = \tilde{E}_{\alpha\beta}e^{-i\omega_{\alpha\beta}t}, \qquad \text{(XXIII.163)}$$

pues con ellos se puede escribir

$$\frac{d^2}{dt^2}\tilde{x}_{\alpha\beta}(t) = -\omega_{\alpha\beta}^2\tilde{x}_{\alpha\beta}(t), \quad \frac{d^3}{dt^3}\tilde{x}_{\alpha\beta}(t) = -i\omega_{\alpha\beta}^3\tilde{x}_{\alpha\beta}(t), \qquad \text{(XXIII.164)}$$

con lo que (XXIII.162) se transforma en

$$m\frac{d^2}{dt^2}\tilde{x}_{\alpha\beta}(t) - m\tau\frac{d^3}{dt^3}\tilde{x}_{\alpha\beta}(t) = \left(\widetilde{f(x)}\right)_{\alpha\beta} + e\tilde{E}_{\alpha\beta}(t). \qquad \text{(XXIII.165)}$$

En términos de las matrices $\hat{x}$, $\hat{f}$ y $\hat{E}$ con elementos de matriz $\tilde{x}_{\alpha\beta}(t)$, $\hat{f}_{\alpha\beta}$ y $\tilde{E}_{\alpha\beta}(t)$, respectivamente, esta ecuación equivale a

$$m\frac{d^2\hat{x}}{dt^2} - m\tau\frac{d^3\hat{x}}{dt^3} = \hat{f} + e\hat{E}. \qquad \text{(XXIII.166)}$$

[7]Mayores detalles pueden verse en L. de la Peña y A.M. Cetto, *The Quantum Dice. An introduction to stochastic electrodynamics* (Kluwer, Dordrecht, 1996), capítulo 10.

Cuando en estas ecuaciones se desprecian los efectos del campo y de la reacción de radiación, se obtiene

$$m\frac{d^2\hat{x}}{dt^2} = \hat{f}, \tag{XXIII.167}$$

que equivale a la correspondiente ecuación de Heisenberg en términos matriciales. La razón por la cual es permitido despreciar las contribuciones del campo y de la reacción de radiación para pasar de (XXIII.166) a (XXIII.167) es que sus efectos básicos han sido ya tomados en cuenta precisamente al dar a la ecuación de movimiento su estructura matricial. Por lo tanto, en la ecuación (XXIII.166) estos términos representan meras correcciones radiativas y pueden ser dejados de lado para construir una primera aproximación, la que bien podría ser denominada *aproximación mecánica*.

Bajo las reglas anteriores, se tiene de (XXIII.154)

$$\omega_{\alpha\beta} = \omega_{\alpha\beta'} + \omega_{\beta'\beta}, \tag{XXIII.168}$$

y resultados similares (con un número arbitrario de sumandos en el lado derecho) para casos más generales. La manera general de garantizar la satisfacción automática de todas estas ecuaciones es escribiendo cada frecuencia como la suma de dos términos,

$$\omega_{\alpha\beta} = \Omega_\alpha - \Omega_\beta, \tag{XXIII.169}$$

pues así se tiene que

$$\begin{aligned} \omega_{\alpha\beta'} + \omega_{\beta'\gamma'} + \cdots + \omega_{\eta\beta} &= \Omega_\alpha - \Omega_{\beta'} + \Omega_{\beta'} - \Omega_{\gamma'} + \cdots + \Omega_\eta - \Omega_\beta \\ &= \Omega_\alpha - \Omega_\beta = \omega_{\alpha\beta}. \end{aligned} \tag{XXIII.170}$$

De las ecuaciones de movimiento se deriva que las cantidades Ω_α tienen un significado físico preciso; específicamente, se demuestra que debe ponerse $\Omega_\alpha = E_\alpha/\hbar$, con lo que la ecuación (XXIII.169) se convierte en la regla de Bohr para las frecuencias de transición. La regla (XXIII.169) fue descubierta durante la elaboración de la mecánica matricial por Born, Heisenberg y Jordan, en un contexto algebraico similar al presente, pero con un significado físico diferente.

XXIII.3. Ejercicios

XXIII.13 El ruido blanco estacionario se llama así porque su densidad espectral es una constante, la misma para todas las frecuencias. Demuestre en detalle que la función de autocorrelación de un ruido blanco es $\langle E(t')E(t)\rangle = A\delta(t'-t)$ y exprese el valor de la constante A en términos de la densidad de potencia.

XXIII.14 Demuestre que si se mantiene la reacción de radiación en la ecuación (XXIII.55) sin modificar, la solución estacionaria es

$$x(t) = \frac{e}{\sqrt{2\pi}m}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{E}(\omega)e^{-i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\tau\omega^3}d\omega.$$

Compruebe que hasta términos lineales en τ, la solución (XXIII.73) es equivalente a la expresión anterior incluso para frecuencias muy altas, pero tales que $\tau\omega \ll 1$. Esto comprueba que el hecho de dejar la expresión integral para la fuerza eléctrica en la ecuación (XXIII.67) es un mecanismo indirecto para recuperar el término $i\tau\omega^3$ que controla el comportamiento de la integral a altas frecuencias.

XXIII.15 Calcule $\langle \dot{x}^2 \rangle$ con la fórmula (XXIII.86), introduciendo en el integrando un corte abrupto a una cierta frecuencia ω_c. Determine un valor apropiado para esta frecuencia de corte y muestre que el resultado es independiente de esta selección cuando $\omega_c \to \infty$.

XXIII.16 Resuelva el problema del átomo estudiado en el problema XXIII.11, suponiendo que el campo de fondo es un ruido blanco.

A. Apéndices matemáticos

A.1. Algunas constantes y unidades físicas

Angstrom	Å	10^{-10} m
Fermi	fm	10^{-15} m
Barn	b	10^{-28} m^2
Electronvolt	eV	$\begin{cases} 1.6021 \times 10^{-19} \text{ J} \\ 1.6021 \times 10^{-12} \text{ erg} \end{cases}$
1 cal		$\begin{cases} 4.184 \text{ J} \\ 2.611 \times 10^{19} \text{ eV} \end{cases}$
1 u.a.m.	$(1/12)\, M_{12_C}$	$\begin{cases} 1.6605931 \times 10^{-27} \text{ kg} \\ 931.502 \text{ MeV/c}^2 \end{cases}$
Carga del electrón	e	-1.6021×10^{-19} C
Masa del electrón	m_e	$\begin{cases} 9.1095 \times 10^{-31} \text{ kg} \\ 0.511003 \text{ MeV/c}^2 \end{cases}$
Masa del protón	m_p	$\begin{cases} 1836.15\ m_e \\ 1.6726 \times 10^{-27} \text{ kg} \\ 938.280 \text{ MeV/c}^2 \\ 1.007276 \text{ u.a.m.} \end{cases}$
Velocidad de la luz (vacío)	c	$\begin{cases} 2.9979 \times 10^{8} \text{ m/s} \\ 137.036 \text{ u.a.} \end{cases}$
Constante de Planck	$\begin{cases} \hbar \\ \hbar c \\ \hbar\omega_{\text{visible}} \end{cases}$	$\begin{cases} 1.0545 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \\ 6.5819 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s} \end{cases}$ $\begin{cases} 1.988 \times 10^{-25} \text{ J} \cdot \text{m} \\ 1.9732 \times 10^{-11} \text{ MeV·cm} \end{cases}$ ~ 2 eV
Número de Avogadro	N_A	6.0220×10^{23} part/mol
Permeabilidad del espacio libre	μ_0	$4\pi \times 10^{-7}$ H/m
Permitividad del espacio libre	$\varepsilon_0 = 1/\mu_0 c^2$	8.8541×10^{-12} F/m
Radio clásico del electrón	$r_0 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m c^2}$	2.8179×10^{-15} m

Constante de estructura fina	$\alpha = e^2/\hbar c$	$1/137.036$
Longitud de onda de Compton del electrón	$\lambda_C = \hbar/m_e c$	3.8615×10^{-3} Å
Radio de Bohr	$a_0 = \lambda_C/\alpha$	0.5291 Å
Constante de Rydberg	R_H	109677.581 1/cm
Magnetón de Bohr	$\mu_B = \lvert e\rvert\, \hbar/2m_0$	9.2740×10^{-24} J/tesla
Constante de Boltzmann	$\begin{cases} k_B \\ \\ k_B T_{\text{ambiente}} \end{cases}$	$\begin{cases} 1.3806 \times 10^{-23} \text{ J/K} \\ 8.6174 \times 10^{-5} \text{ eV/K} \end{cases}$ ~ 0.025 eV

A.2. Identidades de uso frecuente

u, v : campos escalares; $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}, \mathbf{F}$: campos vectoriales

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) &= (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})\, \mathbf{B} - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})\, \mathbf{C} \\
(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{C} &= (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})\, \mathbf{B} - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C})\, \mathbf{A} \\
\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) &= (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C} = (\mathbf{C} \times \mathbf{A}) \cdot \mathbf{B} \\
(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) &= (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})\, (\mathbf{B} \cdot \mathbf{D}) - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{D})\, (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}) \\
(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \times (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) &= [\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{D})]\, \mathbf{C} - [\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C})]\, \mathbf{D} \\
&= [\mathbf{A} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D})]\, \mathbf{B} - [\mathbf{B} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D})]\, \mathbf{A} \\
\nabla \times (\nabla u) &= 0 \\
\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) &= 0 \\
\nabla \cdot (\nabla u) &= \nabla^2 u \\
\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) &= \nabla\, (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} \\
\nabla\, (uv) &= u \nabla v + v \nabla u \\
\nabla \cdot (u\mathbf{A}) &= (\nabla u) \cdot \mathbf{A} + u \nabla \cdot \mathbf{A} \\
\nabla \times (u\mathbf{A}) &= (\nabla u) \times \mathbf{A} + u \nabla \times \mathbf{A} \\
\nabla \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) &= \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) \\
\nabla\, (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) &= (\mathbf{A} \cdot \nabla)\, \mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla)\, \mathbf{A} + \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{B}) + \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \\
\nabla \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) &= (\mathbf{B} \cdot \nabla)\, \mathbf{A} - (\mathbf{A} \cdot \nabla)\, \mathbf{B} + \mathbf{A}\, (\nabla \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B}\, (\nabla \cdot \mathbf{A}) \\
\mathbf{F} &= \hat{\mathbf{n}}\, (\mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{n}}) + \hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{F} \times \hat{\mathbf{n}}) = \mathbf{F}_{\parallel} + \mathbf{F}_{\perp} \\
\int_V (\nabla \cdot \mathbf{F})\; dv &= \oint_S \mathbf{F} \cdot d\mathbf{a} \quad \text{(Teorema de Gauss o de la divergencia)} \\
\int_V (\nabla \times \mathbf{F})\; dv &= -\int_S \mathbf{F} \times d\mathbf{a} \quad \text{(Variante del Teorema de Gauss)} \\
\int_S (\nabla \times \mathbf{F})\; \cdot d\mathbf{a} &= \oint_C \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} \quad \text{(Teorema de Stokes)} \\
\int_V (\nabla u)\; dv &= \int_S u\; d\mathbf{a} \quad \text{(Variante del Teorema de Gauss)}
\end{aligned}
$$

A.3. Coordenadas curvilíneas

A.3.1. Coordenadas esféricas

Definición:

$$x = r\ \text{sen}\,\theta\cos\varphi, \quad y = r\,\text{sen}\,\theta\,\text{sen}\,\varphi, \quad z = r\cos\theta,$$

con

$$0 \le r < \infty, \quad 0 \le \theta \le \pi, \quad 0 \le \varphi \le 2\pi.$$

$$\frac{\partial r}{\partial x_i} = \frac{x_i}{r}, \quad \frac{\partial x_i}{\partial r} = \frac{x_i}{r}.$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi, \quad \frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{1}{r}\cos\theta\,\text{sen}\,\varphi, \quad \frac{\partial\theta}{\partial z} = -\frac{1}{r}\,\text{sen}\,\theta.$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{1}{r\,\text{sen}\,\theta}\,\text{sen}\,\varphi, \quad \frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{1}{r\,\text{sen}\,\theta}\cos\varphi, \quad \frac{\partial\varphi}{\partial z} = 0.$$

Vectores unitarios:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{a}}_r &= \hat{\mathbf{i}}\,\text{sen}\,\theta\cos\varphi + \hat{\mathbf{j}}\,\text{sen}\,\theta\,\text{sen}\,\varphi + \hat{\mathbf{k}}\cos\theta,\\
\hat{\mathbf{a}}_\theta &= \hat{\mathbf{i}}\cos\theta\cos\varphi + \hat{\mathbf{j}}\cos\theta\,\text{sen}\,\varphi - \hat{\mathbf{k}}\,\text{sen}\,\theta,\\
\hat{\mathbf{a}}_\varphi &= -\hat{\mathbf{i}}\,\text{sen}\,\varphi + \hat{\mathbf{j}}\cos\varphi.\\
\hat{\mathbf{i}} &= \hat{\mathbf{a}}_r\,\text{sen}\,\theta\cos\varphi + \hat{\mathbf{a}}_\theta\cos\theta\cos\varphi - \hat{\mathbf{a}}_\varphi\,\text{sen}\,\varphi,\\
\hat{\mathbf{j}} &= \hat{\mathbf{a}}_r\,\text{sen}\,\theta\,\text{sen}\,\varphi + \hat{\mathbf{a}}_\theta\cos\theta\,\text{sen}\,\varphi + \hat{\mathbf{a}}_\varphi\cos\varphi,\\
\hat{\mathbf{k}} &= \hat{\mathbf{a}}_r\cos\theta - \hat{\mathbf{a}}_\theta\,\text{sen}\,\theta.
\end{aligned}$$

$$\hat{\mathbf{a}}_r \times \hat{\mathbf{a}}_\theta = \hat{\mathbf{a}}_\varphi, \quad \hat{\mathbf{a}}_r \times \hat{\mathbf{a}}_\varphi = -\hat{\mathbf{a}}_\theta, \quad \hat{\mathbf{a}}_\theta \times \hat{\mathbf{a}}_\varphi = \hat{\mathbf{a}}_r,$$

$$\frac{\partial\hat{\mathbf{a}}_r}{\partial\theta} = \hat{\mathbf{a}}_\theta, \quad \frac{\partial\hat{\mathbf{a}}_\theta}{\partial\theta} = -\hat{\mathbf{a}}_r, \quad \frac{\partial\hat{\mathbf{a}}_\varphi}{\partial\theta} = 0,$$

$$\frac{\partial\hat{\mathbf{a}}_r}{\partial\varphi} = \hat{\mathbf{a}}_\varphi\,\text{sen}\,\theta, \quad \frac{\partial\hat{\mathbf{a}}_\theta}{\partial\varphi} = \hat{\mathbf{a}}_\varphi\cos\theta, \quad \frac{\partial\hat{\mathbf{a}}_\varphi}{\partial\varphi} = -\hat{\mathbf{a}}_r\,\text{sen}\,\theta - \hat{\mathbf{a}}_\theta\cos\theta.$$

Elemento de longitud:

$$d\mathbf{r} = \hat{\mathbf{a}}_r\,dr + \hat{\mathbf{a}}_\theta r\,d\theta + \hat{\mathbf{a}}_\varphi r\,\text{sen}\,\theta\,d\varphi.$$

Elemento de área:

$$da = r^2\,\text{sen}\,\theta\,d\theta\,d\varphi.$$

Elemento de volumen:

$$dv = r^2\,\text{sen}\,\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi.$$

Operadores diferenciales:

$$
\begin{aligned}
\text{grad}u &= \nabla u = \hat{\mathbf{a}}_r \frac{\partial u}{\partial r} + \hat{\mathbf{a}}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial \theta} + \hat{\mathbf{a}}_\varphi \frac{1}{r\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial u}{\partial \varphi}, \\
\text{div}\mathbf{A} &= \nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 A_r + \frac{1}{r\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\,\text{sen}\,\theta A_\theta + \frac{1}{r\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial A_\varphi}{\partial \varphi}, \\
\text{rot}\mathbf{A} &= \nabla \times \mathbf{A} = \hat{\mathbf{a}}_r \frac{1}{r\,\text{sen}\,\theta}\left(\frac{\partial}{\partial \theta}\,\text{sen}\,\theta A_\varphi - \frac{\partial A_\theta}{\partial \varphi}\right) \\
&\quad + \frac{\hat{\mathbf{a}}_\theta}{r}\left(\frac{1}{\text{sen}\,\theta}\frac{\partial A_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial}{\partial r} r A_\varphi\right) + \frac{\hat{\mathbf{a}}_\varphi}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r} r A_\theta - \frac{\partial A_r}{\partial \theta}\right), \\
\nabla^2 u &= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r u + \frac{1}{r^2\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\,\text{sen}\,\theta \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2\,\text{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} \\
\nabla^2 \mathbf{A}\,|_r &= \left(-\frac{2}{r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\cos\theta}{r^2\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2\,\text{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right) A_r \\
&\quad + \left(-\frac{2}{r^2}\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{2\cos\theta}{r^2\,\text{sen}\,\theta}\right) A_\theta + \left(-\frac{2}{r^2\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right) A_\varphi \\
&= \nabla^2 A_r - \frac{2}{r^2} A_r - \frac{2}{r^2}\frac{\partial A_\theta}{\partial \theta} - \frac{2\cos\theta}{r^2\,\text{sen}\,\theta} A_\theta - \frac{2}{r^2\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial A_\varphi}{\partial \varphi}, \\
\nabla^2 \mathbf{A}\,|_\theta &= \nabla^2 A_\theta - \frac{1}{r^2\,\text{sen}^2\,\theta} A_\theta + \frac{2}{r^2}\frac{\partial A_r}{\partial \theta} - \frac{2\cos\theta}{r^2\,\text{sen}^2\,\theta}\frac{\partial A_\varphi}{\partial \varphi}, \\
\nabla^2 \mathbf{A}\,|_\varphi &= \nabla^2 A_\varphi - \frac{1}{r^2\,\text{sen}^2\,\theta} A_\varphi + \frac{2}{r^2\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial A_r}{\partial \varphi} + \frac{2\cos\theta}{r^2\,\text{sen}^2\,\theta}\frac{\partial A_\theta}{\partial \varphi}. \\
\nabla &= \hat{\mathbf{a}}_r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{\hbar r^2}\mathbf{r} \times \mathbf{L}, \\
\nabla^2 &= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2}.
\end{aligned}
$$

A.3.2. Coordenadas cilíndricas

Definición:

$$x = \rho\cos\varphi, \quad y = \rho\,\text{sen}\,\varphi, \quad z = z,$$

con

$$0 \le \rho < \infty, \quad 0 \le \varphi \le 2\pi, \quad -\infty < z < \infty.$$

Vectores unitarios:

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathbf{a}}_\rho &= \hat{\mathbf{i}}\cos\varphi + \hat{\mathbf{j}}\,\text{sen}\,\varphi, \\
\hat{\mathbf{a}}_\varphi &= -\hat{\mathbf{i}}\,\text{sen}\,\varphi + \hat{\mathbf{j}}\cos\varphi, \\
\hat{\mathbf{k}} &= \hat{\mathbf{k}}. \\
\hat{\mathbf{i}} &= \hat{\mathbf{a}}_\rho\cos\varphi - \hat{\mathbf{a}}_\varphi\,\text{sen}\,\varphi, \\
\hat{\mathbf{j}} &= \hat{\mathbf{a}}_\rho\,\text{sen}\,\varphi + \hat{\mathbf{a}}_\varphi\cos\varphi. \\
\hat{\mathbf{a}}_\rho \times \hat{\mathbf{a}}_\varphi &= \hat{\mathbf{k}}, \quad \hat{\mathbf{a}}_\varphi \times \hat{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{a}}_\rho, \quad \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{a}}_\rho = \hat{\mathbf{a}}_\varphi, \\
\frac{\partial \hat{\mathbf{a}}_\rho}{\partial \varphi} &= \hat{\mathbf{a}}_\theta, \quad \frac{\partial \hat{\mathbf{a}}_\varphi}{\partial \varphi} = -\hat{\mathbf{a}}_\rho.
\end{aligned}
$$

Elemento de longitud:

$$d\mathbf{r} = \hat{\mathbf{a}}_\rho\, d\rho + \hat{\mathbf{a}}_\varphi\, \rho d\varphi + \hat{\mathbf{k}}\, dz.$$

Elemento de volumen:

$$dv = r\,dr\,d\theta\,dz.$$

Operadores diferenciales:

$$\begin{aligned}
\nabla u &= \hat{\mathbf{a}}_\rho \frac{\partial u}{\partial \rho} + \hat{\mathbf{a}}_\varphi \frac{1}{\rho}\frac{\partial u}{\partial \varphi} + \hat{\mathbf{k}}\frac{\partial u}{\partial z},\\
\nabla \cdot \mathbf{F} &= \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}(\rho F_\rho) + \frac{1}{\rho}\frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial F_z}{\partial z},\\
\nabla \times \mathbf{F} &= \frac{1}{\rho}\begin{vmatrix} \hat{\mathbf{a}}_\rho & \rho\hat{\mathbf{a}}_\varphi & \hat{\mathbf{k}} \\ \frac{\partial}{\partial \rho} & \frac{\partial}{\partial \varphi} & \frac{\partial}{\partial z} \\ F_\rho & \rho F_\varphi & F_z \end{vmatrix},\\
\nabla^2 u &= \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho\frac{\partial u}{\partial \rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2},\\
\nabla^2 \mathbf{F}\,|_\rho &= \nabla^2 F_\rho - \frac{1}{\rho^2}F_\rho - \frac{2}{\rho^2}\frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi},\\
\nabla^2 \mathbf{F}\,|_\varphi &= \nabla^2 F_\varphi - \frac{1}{\rho^2}F_\varphi + \frac{2}{\rho^2}\frac{\partial F_\rho}{\partial \varphi},\\
\nabla^2 \mathbf{F}\,|_z &= \nabla^2 F_z,\\
\nabla &= \hat{\mathbf{a}}_\rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \hat{\mathbf{a}}_\varphi \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \varphi} + \hat{\mathbf{k}}\frac{\partial}{\partial z}.
\end{aligned}$$

A.3.3. Coordenadas parabólicas

Definición:

$$x = \xi\eta\cos\varphi, \quad y = \xi\eta\,\mathrm{sen}\,\varphi, \quad z = \tfrac{1}{2}\left(\xi^2 - \eta^2\right),$$

con

$$0 \le \xi < \infty, \quad 0 \le \eta < \infty, \quad 0 \le \varphi \le 2\pi.$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{\eta\cos\varphi}{\xi^2+\eta^2}, \quad \frac{\partial \xi}{\partial y} = \frac{\eta\,\mathrm{sen}\,\varphi}{\xi^2+\eta^2}, \quad \frac{\partial \xi}{\partial z} = \frac{\xi}{\xi^2+\eta^2}.$$

Vectores unitarios:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{a}}_\xi &= \hat{\mathbf{i}}\eta\cos\varphi + \hat{\mathbf{j}}\eta\,\mathrm{sen}\,\varphi + \hat{\mathbf{k}}\xi,\\
\hat{\mathbf{a}}_\eta &= \hat{\mathbf{i}}\xi\cos\varphi + \hat{\mathbf{j}}\xi\,\mathrm{sen}\,\varphi - \hat{\mathbf{k}}\eta,\\
\hat{\mathbf{a}}_\varphi &= -\hat{\mathbf{i}}\xi\eta\,\mathrm{sen}\,\varphi + \hat{\mathbf{j}}\xi\eta\cos\varphi.
\end{aligned}$$

Elemento de volumen:

$$dv = \xi\eta\left(\xi^2+\eta^2\right)\,d\xi\,d\eta\,d\varphi.$$

Operadores diferenciales:

$$\nabla^2 u = \frac{1}{\xi^2+\eta^2}\left(\frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial \xi}\xi\frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{1}{\eta}\frac{\partial}{\partial \eta}\eta\frac{\partial u}{\partial \eta}\right) + \frac{1}{\xi^2\eta^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}.$$

A.4. Delta de Dirac

Propiedades:

$$\begin{aligned}
\delta(x) &= 0, \quad x \neq 0, \\
\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x)\,dx &= f(0), \\
\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx &= 1. \\
\delta(ax-b) &= \frac{1}{|a|}\delta\left(x-\frac{b}{a}\right), \\
f(x)\delta(x) &= f(0)\delta(x), \quad x\delta(x)=0, \\
f(x)\delta'(x) &= f(0)\delta'(x) - f'(0)\delta(x), \\
x\delta^{(m)}(x) &= -m\delta^{(m-1)}(x), \\
x^n\delta^{(m)}(x) &= 0 \quad \text{para } n \geq m+1, \\
\delta\left[f(x)\right] &= \sum_n \frac{1}{|f'(x_n)|}\delta\left[x-x_n\right], \quad f(x_n)=0,\ f'(x_n)\neq 0, \\
\delta\left(x^2-a^2\right) &= \frac{1}{2\,|a|}\left[\delta(x-a)+\delta(x+a)\right], \\
\lim_{\eta\to 0^+}\frac{1}{\eta}e^{-x^2/\eta^2} &= \sqrt{\pi}\delta(x), \\
\lim_{\eta\to 0^+}\frac{\eta}{\eta^2+x^2} &= \pi\delta(x), \\
\delta_+(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty e^{i\omega t}dt = \frac{i}{2\pi}\lim_{\varepsilon\to 0^+}\frac{1}{\omega+i\varepsilon} = \frac{i}{2\pi}\mathrm{P}\frac{1}{\omega}+\frac{1}{2}\delta(\omega), \\
\delta_-(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty e^{-i\omega t}dt = -\frac{i}{2\pi}\lim_{\varepsilon\to 0^+}\frac{1}{\omega-i\varepsilon} = -\frac{i}{2\pi}\mathrm{P}\frac{1}{\omega}+\frac{1}{2}\delta(\omega), \\
\nabla^2\,|x| &= 2\delta(x), \\
\nabla^2\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} &= -4\pi\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0).
\end{aligned}$$

En coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned}
\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0\right) &= \frac{1}{r^2\,\mathrm{sen}\,\theta}\delta(r-r_0)\delta\left(\theta-\theta_0\right)\delta\left(\varphi-\varphi_0\right), \quad x_0,y_0,z_0\neq 0; \\
&= \frac{1}{2\pi r^2\,\mathrm{sen}\,\theta}\delta\left(r-r_0\right)\delta\left(\theta\right), \quad x_0,y_0=0,\ z_0\neq 0; \\
&= \frac{1}{4\pi r^2}\delta(r), \quad x_0,y_0,z_0=0.
\end{aligned}$$

En general:

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = \frac{1}{|J(x_i,\xi_i)|}\delta\left(\xi_1-\xi_1^0\right)\delta\left(\xi_2-\xi_2^0\right)\delta\left(\xi_3-\xi_3^0\right).$$

A.5. Función gamma

Definiciones:

$$\Gamma(z) \equiv \lim_{n\to\infty}\frac{1\cdot 2\cdot 3\cdots n}{z(z+1)(z+2)\cdots(z+n)}, \quad z\neq 0,-1,-2,-3,\ldots \quad \text{(Euler)},$$

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^\infty e^{-t}t^{z-1}dt, \quad \text{Re } z > 0 \quad \text{(Euler)},$$

$$\frac{1}{\Gamma(z)} \equiv ze^{\gamma z}\prod_{n=1}^{\infty}\left(1+\frac{z}{n}\right)e^{-z/n} \quad \text{(Weierstrass)};$$

γ es la constante de Euler-Mascheroni, $\gamma = 0.577216\ldots$
Para $-(n+1) < Re(z) \leq -n, \quad z \neq 0, -1, -2, \ldots$ la función Γ se define por medio de la fórmula de recurrencia

$$\Gamma(z) = \frac{\Gamma(z+1)}{z} = \frac{\Gamma(z+n+1)}{z(z+1)\cdots(z+n)}.$$

Los puntos $z = 0, -1, -2, \ldots$ son polos simples de $\Gamma(z)$.
Relaciones funcionales:

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\operatorname{sen} n\pi}.$$

Si β es un número real

$$|\Gamma(1+i\beta)|^2 = \frac{\pi\beta}{\operatorname{senh}\pi\beta}.$$

Valores y relaciones particulares:

$$\begin{aligned}\Gamma(x+1) &= x\Gamma(x),\\ \Gamma(n) &= (n-1)!,\\ \Gamma\left(n+\tfrac{1}{2}\right) &= \frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\pi}, \quad \Gamma\left(\tfrac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi},\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}(2n+1)!! &= 1\cdot 3\cdot 5\cdots(2n+1) = \frac{(2n+1)!}{2^n n!},\\ (2n)!! &= 2\cdot 4\cdot 6\cdots 2n = 2^n n!.\end{aligned}$$

Comportamiento asintótico:
Para $|z| \to \infty$,

$$\Gamma(z) \sim \sqrt{2\pi}z^{z-1/2}e^{-z}\left(1+\frac{1}{12z}+\frac{1}{288z^2}-\cdots\right), \quad |\arg z| \leq \pi-\delta, \quad 0 < \delta \ll 1.$$

Para x real, con $x \to \infty$,

$$\Gamma(x) \sim \sqrt{2\pi}x^{x-1/2}e^{-x}.$$

A.6. Polinomios ortogonales y funciones especiales

A.6.1. Polinomios de Hermite

Definición (Fórmula de Rodrigues):

$$\begin{aligned}H_n(x) &= (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}.\\ H_n(x) &= \sum_{n=0}^{[n/2]}(-1)^s(2x)^{n-2s}\frac{n!}{(n-2s)!s!}\\ &= (2x)^n - \frac{n(n-1)}{1!}(2x)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}(2x)^{n-4}+\cdots\end{aligned}$$

Función generadora:

$$F(x,t) = e^{-t^2+2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{k!} H_n(x), \quad H_n = \left(\frac{d^n F(x,t)}{dt^n} \right)_{t=0}.$$

Ecuación de Hermite:

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n = 0.$$

Relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned} H_n' &= 2nH_{n-1}, \\ H_{n+1} &= 2xH_n - 2nH_{n-1}. \end{aligned}$$

Paridad:

$$H_n(x) = (-1)^n H_n(-x).$$

Propiedad de ortogonalidad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x)\, dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm}.$$

Casos particulares:

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2x, \quad H_2 = 4x^2 - 2, \quad H_3 = 8x^3 - 12x,$$

$$H_4 = 16x^4 - 48x^2 + 12, \quad H_5 = 32x^5 - 160x^3 + 120x.$$

$$H_{2n}(0) = (-1)^n 2^n (2n-1)!!, \quad H_{2n+1}(0) = 0.$$

A.6.2. Polinomios de Legendre

Fórmula de Rodrigues:

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left(x^2 - 1 \right)^n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \\ P_n(x) &= \sum_{k=0}^{[n/2]} (-1)^k \frac{(2n-2k)!}{2^n k!(n-k)!(n-2k)!} x^{n-2k}. \end{aligned}$$

Función generadora:

$$\left(1 - 2xt + t^2\right)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n, \quad |t| < 1.$$

Ecuación de Legendre:

$$\left(1 - x^2\right) P_n''(x) - 2xP_n'(x) + n(n+1)P_n(x) = 0.$$

Relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned} (2n+1)xP_n(x) &= (n+1)P_{n+1}(x) + nP_{n-1}(x), \quad n = 1, 2, 3, \ldots \\ P_{n+1}'(x) - P_{n-1}'(x) &= (2n+1)P_n(x). \\ (x^2-1)P_n'(x) &= nxP_n(x) - nP_{n-1}(x) \end{aligned}$$

Paridad:

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x).$$

Propiedad de ortogonalidad:

$$\int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x)\, dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{mn}.$$

Casos particulares:

$$P_n(1) = 1, \quad P_n(-1) = (-1)^n,$$

$$P_{2n}(0) = (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}, \quad P_{2n+1}(0) = 0, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \tfrac{1}{2}\left(3x^2 - 1\right),$$

$$P_3(x) = \tfrac{1}{2}\left(5x^2 - 3x\right), \quad P_4(x) = \tfrac{1}{8}\left(35x^4 - 30x^2 + 3\right).$$

A.6.3. Polinomios asociados de Legendre

Definición:

$$P_n^m(x) = \left(1 - x^2\right)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x), \quad -1 \le x \le 1.$$

Fórmula de Rodrigues:

$$P_n^m(x) = \frac{1}{2^n n!} \left(1 - x^2\right)^{m/2} \frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}} \left(x^2 - 1\right)^n, \quad -n \le m \le n.$$

Función generadora:

$$\frac{(2m)! \left(1 - x^2\right)^{m/2}}{2^m m! \left(1 - 2tx + t^2\right)^{m+1/2}} = \sum_{s=0}^{\infty} t^s P_{s+m}^m(x), \quad |t| < 1.$$

Ecuación diferencial:

$$\left(1 - x^2\right) P_n^{m\prime\prime}(x) - 2x P_n^{m\prime}(x) + n(n+1) - \frac{m^2}{1 - x^2} P_n^m(x) = 0.$$

Relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned}
(2n+1) x P_n^m(x) &= (n+m) P_{n-1}^m(x) + (n - m + 1) P_{n+1}^m(x), \\
\left(1 - x^2\right)^{1/2} P_n^{m\prime}(x) &= \tfrac{1}{2} P_n^{m+1}(x) - \tfrac{1}{2}(n+m)(n-m+1) P_n^{m-1}(x). \\
P_{n-1}^{m+1}(x) &= x P_n^{m+1}(x) - (n-m)\sqrt{1 - x^2} P_n^m(x).
\end{aligned}$$

Paridad:

$$P_n^m(-x) = (-1)^{n+m} P_n^m(x).$$

Propiedad de ortogonalidad:

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{+1} P_k^m(x) P_l^m(x)\, dx &= \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{kl}, \\
\int_{-1}^{+1} \frac{P_n^m(x) P_n^k(x)}{1 - x^2}\, dx &= \frac{(n+m)!}{m(n-m)!} \delta_{mk}.
\end{aligned}$$

Casos particulares:

$$\begin{aligned}
P_n^{-m}(x) &= (-1)^m \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(x), \\
P_n^0(x) &= P_n(x), \\
P_n^n(x) &= (2n-1)!! \left(1-x^2\right)^{1/2}, \\
P_n^m(0) &= \begin{cases} (-1)^{(n-m)/2} \frac{(n-m)!}{2^n \left(\frac{n-m}{2}\right)! \left(\frac{n+m}{2}\right)!}, & n+m \text{ par}, \\ 0, & n+m \text{ impar}. \end{cases} \\
P_n^m(\pm 1) &= 0, \quad m \neq 0, \\
P_1^1(x) &= \left(1-x^2\right)^{1/2}, \quad P_2^1(x) = 3x \left(1-x^2\right)^{1/2}, \quad P_2^2(x) = 3\left(1-x^2\right), \\
P_3^1(x) &= \tfrac{3}{2}\left(5x^2-1\right)\left(1-x^2\right)^{1/2}, \; P_3^2(x) = 15x\left(1-x^2\right), \; P_3^3(x) = 13\left(1-x^2\right)^{3/2}.
\end{aligned}$$

A.6.4. Armónicos esféricos

Definición:

$$Y_n^m(\theta,\varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}\frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_n^m(\cos\theta) e^{im\varphi},$$

$$n = 0, 1, 2, \ldots, \quad m = 0, 1, \ldots, n;$$

$$Y_n^{-m}(\theta,\varphi) = (-1)^m Y_n^{m*}(\theta,\varphi),$$

Ecuación diferencial:

$$\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta \frac{\partial Y_n^m}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2 Y_n^m}{\partial\varphi^2} + n(n+1)Y_n^m = 0.$$

Relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned}
\cos\theta Y_l^m &= \sqrt{\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1}^m + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1}^m, \\
\operatorname{sen}\theta Y_l^m &= \left[-\sqrt{\frac{(l+1+m)(l+2+m)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1}^{m+1} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1}^{m+1} \right] e^{-i\varphi} \\
\operatorname{sen}\theta Y_l^m &= \left[\sqrt{\frac{(l+1-m)(l+2-m)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1}^{m-1} \right. \\
&\quad \left. - \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1}^{m-1} \right] e^{i\varphi}.
\end{aligned}$$

Propiedad de ortogonalidad:

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_n^{m*}(\theta,\varphi) Y_{n'}^{m'}(\theta,\varphi) \operatorname{sen}\theta \, d\theta \, d\varphi = \delta_{nn'}\delta_{mm'}.$$

Teorema de adición de los armónicos esféricos:

$$\frac{2n+1}{4\pi}P_n(\cos\alpha)=\sum_{m=-n}^{n}Y_n^m(\theta_1,\varphi_1)Y_n^{m*}(\theta_2,\varphi_2),$$

donde α es el ángulo entre las direcciones (θ_1,φ_1) y (θ_2,φ_2)
Casos particulares:

$$Y_n^0=\sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}}P_n(\cos\theta),$$

$$Y_n^n=(-1)^n\sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}}\,\mathrm{sen}^n\,\theta e^{in\varphi},$$

$$Y_0^0(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$Y_1^1(\theta,\varphi)=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\mathrm{sen}\,\theta e^{i\varphi},\ Y_1^0(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,$$

$$Y_1^{-1}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\mathrm{sen}\,\theta e^{-i\varphi},\ Y_2^2(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{5}{96\pi}}3\,\mathrm{sen}^2\,\theta e^{2i\varphi},$$

$$Y_2^1(\theta,\varphi)=-\sqrt{\frac{5}{24\pi}}3\,\mathrm{sen}\,\theta\cos\theta e^{i\varphi},\ Y_2^0(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta-\frac{1}{2}\right),$$

$$Y_2^{-1}=-\sqrt{\frac{5}{24\pi}}3\,\mathrm{sen}\,\theta\cos\theta e^{-i\varphi},\ Y_2^{-2}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{5}{96\pi}}3\,\mathrm{sen}^2\,\theta e^{-2i\varphi}.$$

A.6.5. Polinomios de Laguerre

Fórmula de Rodrigues:

$$\begin{aligned}L_n(x)&=\frac{e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\left(x^ne^{-x}\right),\quad n=0,1,2,\ldots\\ L_n(x)&=\sum_{s=0}^{n}(-1)^{n-s}\frac{n!x^{n-s}}{(n-s)!(n-s)!s!}.\end{aligned}$$

Función generadora:

$$\frac{e^{-xt/(1-t)}}{1-t}=\sum_{n=0}^{\infty}t^nL_n(x),\quad |t|<1.$$

Ecuación de Laguerre:

$$xL_n''(x)+(1-x)L_n'(x)+nL_n(x)=0.$$

Relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned}(n+1)L_{n+1}(x)&=(2n+1-x)L_n(x)-nL_{n-1}(x),\\ xL_n'(x)&=nL_n(x)-nL_{n-1}(x).\end{aligned}$$

Propiedad de ortogonalidad:

$$\int_0^\infty e^{-x}L_m(x)L_n(x)\,dx=\delta_{mn}.$$

Casos particulares:

$$L_n(0) = 1.$$

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = -x + 1, \quad L_2(x) = \frac{1}{2!}\left(x^2 - 4x + 2\right),$$

$$L_3(x) = \frac{1}{3!}\left(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6\right).$$

A.6.6. Polinomios asociados de Laguerre

Definición:

$$L_n^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{n+k}(x), \quad k = 0, 1, 2, \ldots,$$

Fórmula de Rodrigues:

$$\begin{aligned} L_n^k(x) &= \frac{e^x x^{-k}}{n!} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x} x^{n+k}\right). \\ L_n^k(x) &= \sum_{m=0}^{n} (-1)^m \frac{(n+k)! x^m}{(n-m)!(k+m)! m!}, \quad k > -1. \end{aligned}$$

Función generadora:

$$\frac{e^{-xt/(1-t)}}{(1-t)^{k+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} t^n L_n^k(x), \quad |t| < 1.$$

Ecuación asociada de Laguerre:

$$x L_n^{k\prime\prime}(x) + (k + 1 - x) L_n^{k\prime}(x) + n L_n^k(x) = 0.$$

Relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned} (n+1) L_{n+1}^k(x) &= (2n + k + 1 - x) L_n^k(x) - (n + k) L_{n-1}^k(x), \\ x L_n^{k\prime}(x) &= n L_n^k(x) - (n + k) L_{n-1}^k(x). \end{aligned}$$

Propiedad de ortogonalidad:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^k L_n^k(x) L_m^k(x) dx = \frac{(n+k)!}{n!} \delta_{nm}.$$

Casos particulares:

$$L_0^k(x) = 1, \quad L_1^k(x) = -x + k + 1,$$

$$L_2^k(x) = \tfrac{1}{2} x^2 - (k + 2) x + \tfrac{1}{2}(k + 2)(k + 1),$$

$$L_n^k(0) = \frac{(n+k)!}{n! k!}.$$

A.6.7. Funciones cilíndricas de Bessel

Ecuación de Bessel:

$$\frac{d^2f}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{df}{dx} + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2}\right) f = 0,$$

con ν arbitraria (real o compleja) y f alguna de las funciones J_ν, N_ν, $H_\nu^{(1)}$, $H_\nu^{(2)}$.
Definiciones:

a) Función de Bessel de primer género

$$J_\nu(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\Gamma(k+1)\Gamma(k+\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu+2k}.$$

b) Función de Bessel de segundo género o función de Neumann

$$N_\nu(x) = \frac{\cos\nu\pi J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)}{\operatorname{sen}\nu\pi}, \quad |\arg x| < \pi.$$

c) Funciones de Bessel de tercer género o funciones de Hankel

$$\begin{aligned} H_\nu^{(1)}(z) &= J_\nu(z) + iN_\nu(z), \\ H_\nu^{(2)}(z) &= J_\nu(z) - iN_\nu(z). \end{aligned}$$

Función generadora:

$$e^{(x/2)(t-1/2)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x)t^n, \quad n \text{ entero.}$$

Representación integral:

$$J_n(x) = \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \cos(n\theta - x\operatorname{sen}\theta)\, d\theta, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned} f_{n-1}(x) + f_{n+1}(x) &= \frac{2n}{x} f_n(x), \\ f_{n-1}(x) - f_{n+1}(x) &= 2f_n'(x), \end{aligned}$$

donde f_n representa alguna de las funciones J_n, N_n, $H_\nu^{(1)}$, $H_\nu^{(2)}$. Relación de ortogonalidad en $[0, a]$:

$$\int_0^a J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\frac{\rho}{a}\right) J_\nu\left(\alpha_{\nu n}\frac{\rho}{a}\right) \rho\, d\rho = 0,$$

donde $\alpha_{\nu m}$ es el m-ésimo cero de J_ν.
Normalización:

$$\int_0^a \left[J_\nu\left(\alpha_{\nu m}\frac{\rho}{a}\right)\right]^2 \rho\, d\rho = \frac{a^2}{2}\left[J_{\nu+1}(\alpha_{\nu m})\right]^2.$$

Si $a \to \infty$, las raíces discretas $\alpha_{\nu m}$ se convierten en la variable continua α y

$$\int_0^\infty J_\nu(\alpha\rho)J_\nu(\alpha'\rho)\rho\, d\rho = \frac{1}{\alpha}\delta(\alpha - \alpha'), \quad \nu > -\frac{1}{2}.$$

Casos particulares:

$$J_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!(k+n)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2k}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots,$$
$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x), \quad n \text{ entero},$$
$$J_n(-x) = (-1)^n J_n(-x),$$
$$J_{n+1/2}(x) = -\sqrt{\frac{2x}{\pi}} x^n \left(\frac{d}{xdx}\right)^n \frac{\operatorname{sen} x}{x},$$
$$J_{-n-1/2}(x) = \sqrt{\frac{2x}{\pi}} x^n \left(\frac{d}{xdx}\right)^n \frac{\cos x}{x},$$
$$N_{-n}(x) = (-1)^n_n N(x).$$

Desarrollo asintótico:

$$\begin{aligned}
J_\nu(z) &= \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \left\{ P_\nu(z) \cos\left[z - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right] \right. \\
&\quad \left. - Q_\nu(z) \operatorname{sen}\left[z - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right] \right\}, \quad -\pi < \arg z < \pi; \\
N_\nu(z) &= \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \left\{ P_\nu(z) \operatorname{sen}\left[z - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right] \right. \\
&\quad \left. + Q_\nu(z) \cos\left[z - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right] \right\}, \quad -\pi < \arg z < \pi; \\
H_\nu^{(1)}(z) &= \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp i\left[z - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right] \left[P_\nu(z) + iQ_\nu(z)\right], \\
&\qquad -\pi < \arg z < 2\pi; \\
H_\nu^{(2)}(z) &= \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp -i\left[z - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right] \left[P_\nu(z) - iQ_\nu(z)\right], \\
&\qquad -2\pi < \arg z < \pi,
\end{aligned}$$

donde

$$P_\nu(z) = 1 - \frac{\left(4\nu^2-1\right)\left(4\nu^2-9\right)}{2!(8z)^2} + \frac{\left(4\nu^2-1\right)\left(4\nu^2-9\right)\left(4\nu^2-25\right)\left(4\nu^2-49\right)}{4!(8z)^4} - \cdots,$$
$$Q_\nu(z) = \frac{\left(4\nu^2-1\right)}{1!(8z)} - \frac{\left(4\nu^2-1\right)\left(4\nu^2-9\right)\left(4\nu^2-25\right)}{3!(8z)^3} + \cdots$$

A.6.8. Funciones modificadas de Bessel

Definición: para x imaginaria pura se introducen las funciones de Bessel de argumento imaginario:

$$\begin{aligned}
I_\nu(x) &= e^{-\nu\pi i/2} J_\nu\left(xe^{i\pi/2}\right), \\
I_\nu(x) &= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!(s+\nu)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s+\nu}, \\
K_\nu(x) &\equiv \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} H_\nu^{(1)}(ix) \\
&= \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} \left[J_\nu(ix) + iN_\nu(ix)\right] = \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\nu}(x) - I_\nu(x)}{\operatorname{sin} \nu\pi}.
\end{aligned}$$

Función generadora:

$$e^{(x/2)(t+1/t)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} I_n(x)t^n.$$

Relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned} I_{\nu-1}(x) + I_{\nu+1}(x) &= \frac{2\nu}{x} I_\nu(x), \\ I_{\nu-1}(x) + I_{\nu+1}(x) &= 2I'_\nu(x). \\ K_{\nu-1}(x) - K_{\nu+1}(x) &= -\frac{2\nu}{x} K_\nu(x), \\ K_{\nu-1}(x) + K_{\nu+1}(x) &= -2K'_\nu(x). \end{aligned}$$

Casos particulares:

$$\begin{aligned} I_n(x) &= I_{-n}(x). \\ K_\nu(x) &= K_{-\nu}(x). \end{aligned}$$

Desarrollo asintótico:

$$K_\nu(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \left[1 + \frac{\left(4\nu^2 - 1^2\right)}{1!8z} + \frac{\left(4\nu^2 - 1^2\right)\left(4\nu^2 - 3^2\right)}{2!\left(8z\right)^2} + \cdots \right],$$

$$I_\nu(z) = \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}} \left[P_\nu(iz) - iQ_\nu(iz) \right],$$

$$-\frac{\pi}{2} < \arg z < \frac{\pi}{2}.$$

A.6.9. Funciones esféricas de Bessel

Definiciones:

$$\begin{aligned} j_n(x) &= \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} J_{n+1/2}(x), \\ n_n(x) &= \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} N_{n+1/2}(x) = (-1)^{n+1} \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} J_{-n-1/2}(x), \\ h_n^{(1)}(x) &= \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} H_{n+1/2}^{(1)}(x) = j_n(x) + in_n(x), \\ h_n^{(2)}(x) &= \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} H_{n+1/2}^{(2)}(x) = j_n(x) - in_n(x). \end{aligned}$$

Función generadora:

$$\begin{aligned} \frac{1}{x} \cos\sqrt{x^2 - 2xt} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} j_{n-1}(x), \\ \frac{1}{x} \operatorname{sen}\sqrt{x^2 + 2xt} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-t)^n}{n!} n_{n-1}(x). \end{aligned}$$

Ecuación diferencial:

$$f_n'' + \frac{2}{x} f_n' + \left[1 - \frac{n(n+1)}{x^2} \right] f_n = 0.$$

La solución regular en el origen es $f_n = j_n$, mientras que las soluciones irregulares en el origen son $f_n = n_n$, $h_n^{(1)}$ y $h_n^{(2)}$.
Relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned} f_{n-1}(x) + f_{n+1}(x) &= \frac{2n+1}{x} f_n(x), \\ n f_{n-1}(x) - (n+1) f_{n+1}(x) &= (2n+1) f_n'(x), \end{aligned}$$

donde f_n representa cualquiera de las funciones j_n, n_n, $h_n^{(1)}$ ó $h_n^{(2)}$.
Propiedad de ortogonalidad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} j_m(x) j_n(x)\, dx = \frac{\pi}{2n+1}\delta_{nm}, \quad m,\ n \geq 0.$$

Comportamiento asintótico:
Para $x \to \infty$

$$j_n(x) \sim \frac{1}{x} \operatorname{sen}\left(x - \tfrac{1}{2}\pi n\right), \quad n_n(x) \sim \frac{1}{x} \cos\left(x - \tfrac{1}{2}\pi n\right),$$

$$h_n^{(1)}(x) \sim \frac{-i}{x} \exp i\left(x - \tfrac{1}{2}\pi n\right), \quad h_n^{(2)}(x) \sim \frac{i}{x} \exp -i\left(x - \tfrac{1}{2}\pi n\right).$$

Para $x \ll 1$,

$$\begin{aligned} j_n(x) &\approx \frac{x^n}{(2n+1)!!} \\ n_n(x) &= -\frac{(2n-1)!!}{x^{n+1}}. \end{aligned}$$

Casos particulares:

$$j_0(x) = \frac{\operatorname{sen} x}{x}, \quad j_1(x) = \frac{\operatorname{sen} x}{x^2} - \frac{\cos x}{x},$$

$$j_2(x) = \left(\frac{3}{x^2} - \frac{1}{x}\right) \operatorname{sen} x - \frac{3}{x^2} \cos x.$$

$$n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}, \quad n_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\operatorname{sen} x}{x},$$

$$n_2(x) = -\left(\frac{3}{x^2} - \frac{1}{x}\right) \cos x - \frac{3}{x^2} \operatorname{sen} x.$$

$$h_0^{(1)}(x) = -\frac{i}{x} e^{ix}, \quad h_1^{(1)}(x) = e^{ix}\left(-\frac{1}{x} - \frac{i}{x^2}\right),$$

$$h_0^{(2)}(x) = \frac{i}{x} e^{-ix}.$$

Fórmula de desarrollo para una onda plana:

$$\begin{aligned} e^{ikx} &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^i j_l(kr) P_l(\cos\theta), \quad x = r\cos\theta; \\ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^i j_l(kr) Y_l^{m*}(\theta_k, \varphi_k) Y_l^m(\theta_r, \varphi_r), \end{aligned}$$

donde (θ_k, φ_k) y (θ_r, φ_r) son los ángulos polares de los vectores $\mathbf{k}$ y $\mathbf{r}$, respectivamente.

A.6.10. Función hipergeométrica

Definición:

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a,b,c;x) &= F(a,b,c;x) = 1 + \frac{ab}{c}\frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)}\frac{x^2}{2!} \\ &\quad + \frac{a(a+1)(a+2)b(b+1)(b+2)}{c(c+1)(c+2)}\frac{x^3}{3!} + \cdots,\ c \neq 0, -1, -2, \ldots \end{aligned}$$

El rango de convergencia es $|x| < 1$ y $x = 1$, para $c > a + b$, y $x = -1$, para $c > a + b - 1$.
Ecuación hipergeométrica:

$$x(1-x)u'' + [c - (a+b+1)x]\,u' - abu = 0$$

con solución general

$$u = C_1 F(a,b,c;x) + C_2 x^{1-c} F(a+1-c, b+1-c, 2-c; x)$$

para $|x| < 1$ y $c \neq 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$
La continuación analítica en puntos fuera del círculo unitario, $|x| \geq 1$, con un corte en $(+1, \infty)$ está dada por

$$\begin{aligned} F(a,b,c;x) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} F(a,b,a+b-c+1;1-x) \\ &\quad + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}(1-x)^{c-a-b} F(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-x), \\ F(a,b,c;x) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)}(-x)^{-a} F(a, a-c+1, a-b+1; \frac{1}{x}) \\ &\quad + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}(-x)^{-b} F(b, b-c+1, b-a+1; \frac{1}{x}). \end{aligned}$$

Comportamiento asíntotico para $|x| \to \infty$:

$$F(a,b,c;x) \sim \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)}(-x)^{-a} + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}(-x)^{-b}.$$

Casos especiales:
Para $a = -n$ ó $b = -n$, $(n = 0, 1, 2, \ldots)$, $F(a,b,c;x)$ se reduce a un polinomio de grado n (polinomio de Jacobi).
Relación con los polinomios de Legendre:

$$P_l(x) = F\left(-l, l+1, 1; \frac{1-x}{2}\right).$$

Relación con los polinomios asociados de Legendre:

$$P_l^m(x) = \frac{\Gamma(l+m+1)}{\Gamma(l-m+1)} \cdot \frac{\left(x^2-1\right)^{m/2}}{2^m \Gamma(1+m)} F\left(m-l, m+l+1, m+1, \frac{1-x}{2}\right),$$

$$|\arg(x \pm 1)| < \pi.$$

A.6.11. Función hipergoemétrica confluente

Definición:

$$\begin{aligned} F(a,c;x) &= {}_1F_1(a,c;x) = M(a,c;x) \\ &= 1 + \frac{a}{c}\frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)}\frac{x^2}{2!} + \frac{a(a+1)(a+2)}{c(c+1)(c+2)}\frac{x^3}{3!} + \cdots \end{aligned}$$

La serie es convergente en todo el plano complejo.
Para $c \neq -n$, $(n = 0, 1, 2, \ldots)$, $F(a,c;x)$ se define como

$$\lim_{c\to -n} \frac{F(a,c;x)}{\Gamma(c)} = \frac{\Gamma(a+n+1)}{\Gamma(a)}\frac{x^{n+1}}{(n+1)!}F(a+n+1, n+2; x).$$

Relación con la serie hipergeométrica:

$$F(a,c;x) = \lim_{b\to\infty} F\left(a, b, c; \frac{x}{b}\right).$$

Ecuación hipergeométrica confluente:

$$xu'' + (c-x)u' - au = 0,$$

con solución general

$$u = C_1 F(a,c;x) + C_2 x^{1-c} F(a-c+1, b+1-c, 2-c; x).$$

Comportamiento asintótico para $|x| \to \infty$:

$$F(a,c;x) \sim e^{-i\pi a}\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)}x^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)}e^x x^{a-c},$$

para $a \neq -n$, $(n = 0, 1, 2, \ldots)$, y el plano x se corta a lo largo del eje imaginario positivo.
Relación con las funciones de Bessel:

$$\begin{aligned} J_\nu(x) &= \frac{e^{-ix}}{\nu!}\left(\frac{x}{2}\right)^\nu F\left(\nu + \tfrac{1}{2}, 2\nu + 1; 2ix\right), \\ I_\nu(x) &= \frac{e^{-x}}{\nu!}\left(\frac{x}{2}\right)^\nu F\left(\nu + \tfrac{1}{2}, 2\nu + 1; 2x\right). \end{aligned}$$

Relación con los polinomios de Laguerre:

$$\begin{aligned} L_n(x) &= F(-n, 1; x), \\ L_n^k(x) &= \frac{(n+k)!}{n!k!}F(-n, k+1; x). \end{aligned}$$

Relación con los polinomios de Hermite:

$$H_n(x) = \begin{cases} (-1)^p \frac{(2p)!}{p!} F\left(-p, \frac{1}{2}; x^2\right), & \text{para} \quad n = 2p, \\ (-1)^p 2\frac{(2p+1)!}{p!} x F\left(-p, \frac{3}{2}; x^2\right), & \text{para} \quad n = 2p+1. \end{cases}$$

A.7. Notación relativista

En la notación de Minkowski la cuarta componente de un cuadrivector es imaginaria; por ejemplo,

$$x = \{x, y, z, ict\}\,, \quad A = \{A_x, A_y, A_z, iA_0\}\,,$$

$$\partial = \left\{ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}, \frac{\partial}{i\partial ct} \right\}.$$

En la métrica de Lorentz el tensor métrico, expresado en términos de sus *componentes covariantes*, es[8]

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} g_{00} & g_{01} & g_{02} & g_{03} \\ g_{10} & g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{20} & g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{30} & g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

El producto escalar de dos vectores es, en esta notación, $A \cdot B = g_{\mu\nu} A^\mu B^\nu$. La forma *contravariante* del tensor métrico se obtiene a partir de

$$g^{\mu\nu} g_{\mu\nu} = \delta^\mu_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

y resulta

$$g^{\mu\nu} = (g^{-1})_{\mu\nu} = \frac{\text{cofactor}(g_{\mu\nu})}{\det(g_{\mu\nu})} = g_{\mu\nu},$$

donde se tomó en cuenta que $\det(g_{\mu\nu}) = -1$. Sólo para el caso de la métrica de Lorentz resulta $g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}$. Por ejemplo, el cuadrivector contravariante de posición es

$$x^\mu = \left\{x^0, x^1, x^2, x^3\right\} \equiv \{ct, x, y, z\}\,,$$

mientras que el covariante es

$$x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu = \{ct, -x, -y, -z\} = \{x_0, x_1, x_2, x_3\}\,.$$

Asimismo, se tiene

$$p^\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} = i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial ct}, -\nabla \right\}.$$

El producto escalar de dos vectores se obtiene por contracción de un índice covariante con uno contravariante; por ejemplo,

$$x \cdot p = x^\mu p_\mu = x_\mu p^\mu = Et - \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}.$$

[8]La notación puede variar de autor en autor; la que se presenta en este apéndice es muy común y corresponde a la utilizada, por ejemplo, en J. D. Björken y S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics* (McGraw Hill, Nueva York, 1964).

A.8. Respuestas a ejercicios seleccionados

I.23 Alrededor de 278°K.

I.24 La energía emitida en un año es de 1.1×10^{34} J, que equivale a una fracción de $6.4{\times}10^{-14}$ de la masa solar.

I.25 $E^+ = E^- \simeq 3$ MeV, $v/c \approx 0.986$.

I.28 $r \simeq 4.74 \times 10^{30}$ m $\simeq 5 \times 10^{11}$ años luz, del orden del radio del universo visible.

I.29 $\hbar\omega \simeq |E_i - E_f| \left(1 - |E_i - E_f| / 2m_f c^2\right)$.

I.31 $Z \sim 50$.

II.13 $\lambda = h/\sqrt{3M_n kT} \sim 1.4$ Å; el haz se difracta.

II.14 $\lambda = 6.64$ Å.

II.15 2.08×10^6 m·s^{-1}.

II.18 De algunas decenas de volts a aproximadamente 4 KV.

II.19 $\operatorname{sen}\varphi \simeq [1 + (u/v)\operatorname{sen}\varphi_0]\operatorname{sen}\varphi_0$.

II.21 $F = \pi^2\hbar^2 N(N+1)(N+2)/12\, ma^3$.

II.22 $\bar{r} = a$.

II.23 a) $p = 2.5 \times 10^{-4}$ Kg·m/s; b) $p = 5.1 \times 10^{-3}$ Kg ·m/s, $\lambda = 0.24$ Å; c) $p = 11$ Kg·m/s, $\lambda = 0.28$Å.

III.10 $\tilde{f}(k) = hd \cdot \operatorname{sen}(kd/2)/(kd/2)$, que se anula para las frecuencias indicadas.

III.11 3.3 Å.

III.12 b)$\sigma_x \sim d/2$; $\sigma_k \sim 2\pi(2/d)$.

V.25 $V_q = (\hbar/2ma_t)\left(\frac{x'^2}{a_t} - 1\right)$, con $x' = x - p_0 t/m$ y $a_t = a\left(1 + (\hbar t/ma)^2\right)$.

VI.24 $S_{11} = S_{22} = 1/(1+i\gamma)\,, S_{21} = S_{12} = -i\gamma e^{i2kb}/(1+i\gamma)\,;\gamma$ como en el problema VI.23.

VII.19 Es condición necesaria y suficiente que $2m|V_0|a^2/\hbar^2 \leq \pi^2/4$.

VIII.30 a) Sí, ± 1; b) $a^2 \geq 1$; c) $0, \pm 2$.

IX.33 $\varphi_{p_0}(p) = \delta(p - p_0)$.

IX.35 $1/[1 + (m_0 v a_0/2\hbar)^2]^4$.

XI.45 $\langle\beta\,|\alpha\rangle = \exp\left[-\frac{1}{2}\left(|\alpha|^2 + |\beta|^2 - 2\alpha\beta^*\right)\right]$.

XI.46 $c_3 = \sqrt{3/10}$, $\langle E\rangle = \frac{12}{5}\hbar\omega_0$.

XII.45 a) $\mathbf{L} = \mathbf{L}' + \mathbf{a} \times \mathbf{P}$, donde $\mathbf{P} = \sum_i \mathbf{p}_i$ es el momento total del sistema; b) $\mathbf{L} = \mathbf{L}' + M\mathbf{R} \times \mathbf{V}$, donde M es la masa total del sistema y $\mathbf{R}$ el vector de posición del centro de masa del sistema.

XII.47 $\psi(\theta, \varphi) = \sqrt{3/4\pi}\operatorname{sen}\theta \cos\varphi$.

XII.53 $\cos(\mathbf{L}, \mathbf{S}) = \left[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right] / 2\sqrt{l(l+1)s(s+1)}$.

XII.54 $P(+1/2) = \cos^2\theta/2, P(-1/2) = \operatorname{sen}^2\theta/2, P(z') = \frac{1}{2}\cos\theta$, donde θ es el ángulo entre los ejes z y z'.

XII.62 para $n = 1$, $Ne^{\pm i\phi} r e^{-r^2/2a^2}$; para $n = 2$, $Ne^{\pm 2i\phi} r^2 e^{-r^2/2a^2}$, $(\frac{r^2}{a^2} - 1)$ $e^{-r^2/2a^2}$.

XIII.45 la única función de onda de esta lista que no ha sido determinada previamente es $\psi_{1,1}(\xi, \varphi) = (1/\beta\sqrt{\pi})\left(\xi^2 - 1\right) e^{-\xi^2/2}$.

XIII.63 $V_0 = \pi^2\hbar^2/8m_0a^2$.

XIII.64 $\mathcal{P} = \pi\hbar^2/4m_0R^5$.

XIII.65 $P = 1/4$.

XIV.45 $\hat{\lambda} = \exp\left[\phi\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{a}\hat{a}\right)/2\right] \hat{a} \exp\left[-\phi\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{a}\hat{a}\right)/2\right]$.

XV.33 Para $S = 3/2$, $E = \lambda$; para $S = 1/2$, $E = -\lambda$, ambos con degeneración de orden 4.

XVI.20 $E_n = \hbar^2(3n)^2/2I$.

XVII.36 $E_0^{\text{var}} = 3/2\pi^{1/3} = 1.024, E_1^{\text{var}} = 3(3/2\pi)^{1/3} = 2.345$.

XVII.37 $E_0^{\text{var}} = -\left(\hbar^2/4m_0a^2\right)\zeta(2\zeta + 1)$, en donde ζ es raíz de la ecuación $x(1+x)^3 = V_0^2$.

XVII.38 $5\hbar^2/4m_0L^2$, en vez de $\pi^2\hbar^2/8m_0L^2$ $(10/\pi^2 = 1.013$, lo que representa un error de 1.3 %, pese a la crudeza de las funciones de prueba).

XVII.49 b) $s > 1/2$; c) $E_1^{var}/E_1 = \frac{1}{2.3381}\frac{3}{2^{4/3}}(2s+1)\left(4s^2-1\right)^{-1/3}$; d) ocurre para $s = 3/2$, con error menor del 2 %; e) $\psi^{\text{var}}(x) = \left(4\beta_0^2/\sqrt{6}\right) x^{3/2} e^{-\beta_0 x}$.

XVIII.18 ${}^1S_0^3$, S_1^3, $P_{0,1,2}^2$, $D_{3/2,5/2}^4$, $D_{1/2,3/2,5/2,7/1}$; a) ${}^1S_0^3$, S_1; b) ${}^1S_0^3$, S_1^1, P_1^3, $P_{0,1,2}$, ${}^1D_2$, ${}^3D_{1,2,3}$.

XVIII.21 $\hbar^2/m_0e^2 = a_0$.

XVIII.22 $w_{1s} = |\varphi_{1s}(\mathbf{p})|^2$, donde $\varphi_{1s}(\mathbf{p}) = \dfrac{1}{\pi}\left(\dfrac{2a_0}{\hbar}\right)^{3/2} \dfrac{1}{\left[1 + (a_0p/\hbar)^2\right]^2}$.

XVIII.24 $2e\left(\frac{1}{r} + \frac{Z^*}{a_0}\right)\exp\left(-2Z^*r/a_0\right)$.

XVIII.28 $l = 0, 1, 2; I = 7 \times 10^{-40}$ kg·m^2.

XIX.15 La distancia entre los dos primeros niveles rotacionales es $\Delta\nu_{\text{rot}} = \hbar/2\pi cI = 41.5$ cm^{-1}; $\Delta\nu_{\text{rot}}/\Delta\nu_{\text{vib}} = 0.0104$.

XIX.16 4.54 eV.

XIX.23 $L = 0, 2, 4, \ldots$, si $S = 0, 2$; $L = 1, 3, 5, \ldots$, si $S = 1$.

XX.36 a) $\sigma = \pi(a+b)^2$, b) $(d\sigma/d\Omega)_{\text{lab}} = (a+b)^2 \cos\theta$ con $\theta_{\text{lab}} \in [0, \pi/2]$ y cero para el resto de los valores.

XX.37 $f(\theta) = -(2m/\hbar^2)V_0 R^2 \operatorname{sen} qR/qR$.

XX.38 $f(\theta) = -(m/2\hbar^2)\sqrt{\pi}V_0\alpha^{-3}\exp\left(-q^2/4\alpha^2\right)$. Con $a^2 = \sqrt{\pi}mV_0/\left(2\hbar^2\alpha^2\right)$ $z = \sqrt{2k/\alpha}$, la sección total es $\sigma = \left(8\pi/\alpha^2\right)(a/z)^4\left[1 - \exp\left(-z^4/4\right)\right]$.

XX.42 $\delta_0 = \arctan\left(\frac{k}{k_1}\tan k_1 a\right) - ka$; $\sigma \simeq 4\pi a^2\left[(\tan k_0 a/k_0 a) - 1\right]^2 \approx (16\pi/9) \times m^2 V_0^2 a^6/\hbar^4$ para $k_0 a \ll 1$, que es lo que se obtiene con la primera aproximación de Born. Se puso $k_0 = (2m_0 V_0)^{1/2}/\hbar$ (cf. ecuación (T20.103)).

XX.43 $\delta_l = \frac{\pi}{2}\left(l + \frac{1}{2} - \lambda\right), \lambda = \left[\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + 2m_0 g/\hbar^2\right]^{1/2}$; como las δ_l no dependen de k, la sección diferencial es de la forma $d\sigma = |F(\theta)|^2/k^2 d\Omega$, con $F(\theta)$ una función independiente de la energía.

XX.44 $\sigma = \left(4\pi\hbar^2/2mE\right)\exp\left(-2mEa^2/\hbar^2\right)$.

XX.45 $d\sigma/d\Omega = (d\sigma_0/d\Omega)\operatorname{sen}^2(N\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}/\hbar)/\operatorname{sen}^2(\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}/\hbar)$.

XXI.35 $a^2 \leq 3$; no es estado puro para ninguna a.

XXI.36 $b = \pm\sqrt{a(1-a)}$; $P_3 = 2a - 1$, $P_+ = P_-^* = 2be^{i\varphi}$.

XXI.37 Si y sólo si $\left\langle \hat{A} \right\rangle_{\rho_1} = \left\langle \hat{A} \right\rangle_{\rho_2}$.

XXI.38 $i\hbar(d/dt)\left\langle \hat{A}(t) \right\rangle_\rho = i\hbar\left\langle \partial\hat{A}/\partial t \right\rangle_\rho + \langle [A(t), H(t)] \rangle_\rho$.

Bibliografía

1. Manuales y tablas matemáticas

[1] M. Abramowitz y A. Stegun (1965), editores, *Handbook of Mathematical Functions, with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (Dover, Nueva York)

[2] G. Arfken (1966, 1985), *Mathematical Methods in Physics* (Academic Press, Nueva York)

[3] E. Butkov (1968), *Mathematical Physics* (Addison-Wesley, Reading)

[4] F. W. Byron Jr. y R. W. Fuller (1970), *Mathematics of Classical and Quantum Physics* (Dover, Nueva York)

[5] I. S. Gradshteyn y I. M. Ryzhik (1980), *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, Orlando)

[6] N. N. Lebedev (1972), *Special Functions and Their Applications* (Dover, Nueva York)

[7] J. Marsden (1973), *Basic Complex Analysis* (W. H. Freeman, San Francisco).

[8] D. Zwillinger (1996), editor, *Standard Mathematical Tables and Formulae*, 30a. edición (CRC Press, Nueva York)

2. Textos de mecánica cuántica

[9] L. E. Ballentine (1990), *Quantum Mechanics* (Prentice Hall, Nueva Jersey)

[10] H. A. Bethe y R. Jackiw (1997), *Intermediate Quantum Mechanics*, 3a. edición (Addison-Wesley, Nueva York)

[11] D. Bohm (1951), *Quantum Theory* (Prentice-Hall, Nueva York)

[12] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloë (1977), *Quantum Mechanics*, Volúmenes I y II (J. Wiley, Nueva York)

[13] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc y G. Grynberg (1989), *Photons and Atoms. Introduction to Quantum Electrodynamics* (J. Wiley, Nueva York).

[14] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc and G. Grynberg (1992), *Atom-Photon Interactions (Basic Processes and Applications)* (J. Wiley, Nueva York).

[15] E. U. Condon y G. H. Shortley (1959), *The Theory of Atomic Spectra* (Cambridge University Press, Cambridge)

[16] D. Cruz-Garritz, J.A. Chamizo y A. Garritz (1986), *Estructura Atómica. Un enfoque químico* (Fondo Educativo Interamericano, México)

[17] A.S. Davydov (1965, 1976), *Quantum Mechanics* (Pergamon, Oxford)

[18] L. de la Peña (1979, 1991), *Introducción a la mecánica cuántica*, 2a. edición (Fondo de Cultura Económica, México)

[19] R. H. Dicke (1966), *Introduction to Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, Reading)

[20] P. A. M. Dirac (1958), *Quantum Mechanics*, 4a. edición (Clarendon Press, Oxford)

[21] R.P. Feynman y A.R. Hibbs (1965), *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, Nueva York)

[22] A. P. French and E. F. Taylor (1978), *An Introduction to Quantum Physics* (Chapman & Hall, Londres; W. W. Norton, Nueva York)

[23] A. Galindo y P. Pascual (1978), *Mecánica Cuántica* (Alhambra, Barcelona)

[24] A. Galindo y P. Pascual (1990), *Quantum Mechanics*, vols. I y II (Springer Verlag, Berlín)

[25] S. Gasiorowicz (1974), *Quantum Physics* (J. Wiley, Nueva York)

[26] H. Goldstein (1980), *Classical Mechanics*, 2a. edición (Addison-Wesley, Reading)

[27] W. Greiner y B. Müller (1989), *Quantum Mechanics*, Volumen I (Introduction), Volumen II (Symmetries), Volumen III (Relativistic Wave Equations) (Springer Verlag, Berlín y Nueva York)

[28] L.D. Landau y E.M. Lifshitz (1965, 1977), *Quantum Mechanics, Nonrelativistic Theory* (Pergamon, Oxford)

[29] R. Loudon (1983), *The Quantum Theory of Light* (Clarendon, Oxford)

[30] E. Merzbacher (1970), *Quantum Mechanics* (J. Wiley, Nueva York)

[31] A. Messiah, *Mécanique Quantique* (1961), Volúmenes I y II (Dunod, París)

[32] P. W. Milonni (1994), *The Quantum Vacuum. An Introduction to Quantum Electrodynamics* (Academic Press, San Diego)

[33] L. Pauling y E.B. Wilson Jr. (1935), *Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemestry* (McGraw-Hill, Nueva York)

[34] C. Sánchez del Río (1991), *Física Cuántica*, volúmenes I y II (Eudema Universidad, Madrid)

[35] D. Saxon (1968), *Elementary Quantum Mechanics* (Holden-Day, San Francisco)

[36] L. I. Schiff (1968), *Quantum Mechanics,* 3a. edición (McGraw-Hill, Nueva York)

[37] A. A. Sokolov, Yu. M. Loskutov y I. M. Ternov (1962), *Kbantobaya Mekhanika* (GUPI, Moscú). Existe traducción (casi completa) al inglés: *Quantum Mechanics* (Holt, Nueva York, 1966)

[38] Transnational College of LEX (TCL), *What is Quantum Mechanics? A physics adventure* (Language Research Foundation, MA). Este es un texto fresco y honesto, escrito por estudiantes, altamente recomendable como introducción al tema; la dirección es: 68 Leonard Street, Belmont, MA 02178.

[39] F. J. Yndurain (1990), *Mecánica Cuántica Relativista* (Alianza, Madrid).

3. Problemarios de mecánica cuántica

[40] J. A. Cronin, D.F. Greenberg y V.L. Telegdi (1967), *University of Chicago Graduate Problems in Physics, with solutions* (Addison-Wesley, Reading)

[41] R. Fernández Alvarez y J. L. Sánchez Gómez (1996), *100 problemas de física cuántica* (Alianza Editorial, Madrid)

[42] S. Flügge (1971), *Practical Quantum Mechanics*, Volúmenes I y II (Springer Verlag, Berlín)

[43] A. Galindo y P. Pascual (1989), *Problemas de Mecánica Cuántica* (Eudema Universidad, Madrid)

[44] I. I. Goldman y V. D. Krivchenkov (1957), *Sbornik zadach po kvantoboi mekhanike* (GITTL, Moscú)

[45] Ch. S. Johnson y L. G. Pedersen (1986), *Problems and Solutions in Quantum Chemistry and Physics* (Dover, Nueva York)

[46] V. I. Kogan y V. M. Galitsky (1963), *Problems in Quantum Mechanics* (Prentice Hall, Nueva Jersey)

[47] S. Kozel, E. Rashba y S. Slavatinskii (1986), *Collected Problems in Physics* (Mir, Moscú)

[48] D. Ter Haar (1964), *Selected Problems in Quantum Mechanics* (Academic Press, Nueva York).

Índice temático y onomástico

Abraham y Lorentz, ecuación de, XXIII.4
Abramowitz, M., IV.10, V.13, XIII.8, XVII.19
absorción
  de un fotón, I.11
  espectro de, XIX.9
  inducida, XVII.14
  resonante, XVII.14, XVII.31
acoplamiento
  de momento angular, XII.44
  de tres espines, XII.39
  espín-órbita, XII.24, XV.14
  materia-campo, XVII.29
  minimal, IX.6, XIII.19
Aharanov y Bohm, efecto, IX.24
amplitud
  de dispersión, XX.7, XX.11, XX.12, XX.17, XX.18, XX.23, XX.26, XX.28, XX.29
  de probabilidad, II.5, XII.40
  de transición, XX.30
amplitudes estocásticas, XXIII.12
anarmónicos, efectos, XIX.11
anchura
  de una distribución normal, II.5
  de una resonancia, VI.13
Angstrom (unidad), XXIV.1
aniquilación, operador de, XI.12–XI.14, XI.18, XIII.33
  de oscilador armónico, XI.8
  estados propios, XI.19
  representación matricial, XI.15
ángulo crítico, VI.20
anticonmutador, IX.1
aproximación
  de Born, XX.7, XX.24
    barrera esférica, XX.7
  de onda larga, XXIII.4
  de onda rotatoria, XVII.27, XVII.30, XXI.31
  de onda *s*, XX.11
  de rango efectivo, XX.18
  dipolar, XI.11, XXIII.2
  mecánica, XXIII.12
  semiclásica, v. método WKB
Arfken, G., X.6, XIII.8, XIII.9
armónicos esféricos, normalización, XII.3, XIV.11
atenuación, coeficiente de, XX.6
átomo, XVII.8, XVII.27
  de dos niveles, XVII.30
átomo de helio, XVIII.4, XVIII.8
  desigualdades de Heisenberg, XVIII.9
  ortohelio, XVIII.4
  parahelio, XVIII.4
átomo de hidrógeno, v. átomo hidrogenoide
  con un potencial adicional, XIII.17
  en un campo eléctrico pulsante, XVII.22
  energía del estado base, VIII.16, XVII.18
  estado base, II.3
  radio característico, VIII.16
  y método variacional, XVII.17, XVII.18
átomo de tritio, XVIII.8
átomo helioide, XVIII.3, XVIII.9
átomo hidrogenoide, XIII.37
  densidad electrónica, XIII.11
  eigenfunciones y eigenvalores, XIII.8, XIII.9, XIII.29, XIII.30
  energía cinética, XIII.31
  estado base, XIII.7, XIII.16
  estados estacionarios, XIII.31
  excentricidad, XIII.12
  función radial, XIII.16
  núcleo extenso, XV.13
  números cuánticos, XIII.30
  operadores de ascenso y descenso, XIII.29
  órbitas circulares, XIII.12
  órbitas elípticas, XIII.12

probabilidad de transición, XIII.22
relación de recurrencia, XIII.15
y método WKB, XIII.35
y teorema del virial, XIII.7
autocorrelación del campo eléctrico, XXIII.3
autoionización, XXIII.11
Avogadro, número de, XIII.19

Baker, Campbell y Hausdorff, fórmula de, XI.31
Ballentine, L. E., XIV.8
Balmer, serie de, II.4, XIII.23, XIV.12
barrera de potencial unidimensional, VI.5, VII.1, VI.15, VI.18, VI.19
coeficiente de reflexión, VI.5, VI.19
coeficiente de transmisión, VI.5, VI.13, VII.1
barrera esférica, XX.7
y aproximación de Born, XX.7
barrera impenetrable, XVII.19
y método variacional, XVII.19
barn (unidad), XXIV.1
base
ortonormal, VIII.10
propia, VIII.12
Bell, desigualdades de, XII.28
Bertrand, teorema de, I.14
Berry, fases de, IX.24
Bethe, H. A., XIV.8, XIV.11, XIV.12
big bang, XIII.32
blindaje, efectos de, XVIII.12, XX.11
Bloch, F., XXI.31
Bloch
ecuaciones ópticas, XXI.31
ecuación de, XXI.16, XXI.22
Bogolyubov, transformación canónica, XIV.27
Bohm, D., II.3
Bohm
interpretación de, V.16
potencial de, V.16
Bohr, N., I.19
Bohr
fórmula de, XVII.14, XVII.27
frecuencia de, XV.22
magnetón de, XIII.18, XV.10, XXIV.1
modelo de, I.12, I.13, I.19, II.3, VIII.16
órbitas circulares de, I.12, I.19
estabilidad, I.12
perímetro de, II.3
velocidad orbital, II.3
postulados de, I.12
radio de, II.1, II.4, XIII.7, XXIV.1
Boltzmann, L., I.2
Born, M., XXIII.12
Born
desarrollo de, XX.22
método de, XX.19
normalización de, IX.21
primera aproximación de, XX.7, XX.10, XX.23, XX.24
bosones, XVI.4, XVI.6, XVI.7, XVI.9, XVI.13, XXI.11
Bragg
difracción de, II.11
ley de, II.11
Braun, E., I.2
Braffort y Marshall, ecuación de, XXIII.4
Breit y Wigner, fórmula de, VI.13
Butkov, E., VIII.23
Byron, F.W., IV.1

cadena lineal de partículas, X.15
Campbell, S. L., XXII.14
campo
constante, V.8
de punto cero, XXIII.2-XXIII.5, XXIII.11
de radiación, XVII.27, XVII.29, XVII.30, XXIII.1, XXIII.7
gravitatorio, I.20, V.13
magnético generado por movimiento orbital, XIII.20
carga efectiva, XVIII.11
carga nuclear, XIV.23
carga nuclear efectiva, XVIII.14, XVIII.15
Casimir, operadores de, XII.11
catástrofe ultravioleta, I.1
Cauchy y Schwarz, desigualdad de, X.15, XXI.26
centro de masa, XII.4

centro dispersor, XX.20, XX.21
Cetto, A.M., XXIII.12
Clebsch y Gordan, coeficientes de, XII.23, XII.25, XII.26, XII.28, XII.29, XX.30
  relaciones de recurrencia, XII.30
Clementi, E., XVIII.12
coeficiente
  de atenuación lineal, XX.6
  de difusión, XXIII.9
  de reflexión, VI.4, VI.5, VI.7, VI.10, VI.12, VI.13, VI.15, VI.20
  de transmisión, VI.4, VI.5, VI.7, VI.10, VI.12, VI.13, VI.15, VI.16, VI.20, VII.1, VII.3, VII.10, VII.11, VII.14
coeficientes de Fourier, III.1
Cohen-Tannoudji, C., XVII.15, XVII.29
coherencias, XXI.3
colapso, XXI.24
colisión
  binaria, XX.3
  elástica, XX.4, XX.20
  energía absorbida en una, XX.3
Collet, J. M., XI.31
completez, relación de, V.3, VIII.11, VIII.18, VIII.29, X.3
componente
  longitudinal, XV.5
  transversal, XV.5
comportamiento asintótico, VIII.22, XIII.33
Condon, E. U., XII.30, XIII.8, XIV.4, XIV.8, XIX.8
Condon y Shortley, fase de, XII.3
configuración electrónica, XVIII.1, XVIII.13
conmutadores, VIII.1, VIII.6, VIII.7
  con el hamiltoniano, VIII.9
  de momento angular, XII.5, XII.10, XII.35
  identidad de Jacobi, VIII.5
  momento angular, XII.12
  oscilador armónico a tiempos diferentes, XI.23
  propiedad de derivación, VIII.5
  propiedades de los, VIII.5, VIII.8, IX.3, IX.8
Compton
  dispersión, I.9, I.18
  efecto, I.8, I.9, I.11
  fórmula de, I.8, I.9, I.18
  longitud de onda de, I.8, I.9, II.8, XXIV.1
conservación de flujo, VI.11, XX.15
constante
  de estructura fina, XIII.23, XVIII.7, XXIV.1
  de pantalla, XVIII.14
continuidad,
  ecuación de, V.1, V.6, V.16, VI.18, XV.17, XXIII.8, XXIII.9
  de la función de onda, VI.19
coordenada
  de centro de masa, XVI.5, XX.1
  relativa, XIII.1, XVI.5, XX.1
coordenadas
  elípticas, XIX.12
  normales, XIII.5, XVI.6, XVI.7
  parabólicas, XIV.8, XIV.12
Coriolis, fuerza de, IX.24
corrección relativista
  a la energía cinética, V.17, XV.12, XV.14
  a la masa del electrón, XIV.26
correcciones radiativas, XXIII.12
correlaciones, IX.16, IX.18
corriente orbital, XIII.37
corrimiento de fase, v. desfasamientos
cosenos directores, XII.20
Coulomb, norma de, XVII.29
creación, operador de, XI.12–XI.14, XI.18, XIII.33
  funciones propias, XI.24
  representación del, XI.21, XI.24
  representación matricial, XI.15
Cronin, J. A., XII.33
Cruz, D., II.1, XVIII.3
cuadruplete, XII.26, XII.39, XII.44, XV.15
cuasipartícula, XIII.2
cuerda vibrante, X.15
cuerpo negro, v. también distribución de Planck, I.1, I.2, I.3, I.16
cuerpo no negro, I.3

cuerpo rígido, operador de rotación, XII.42
Curie y Langevin, fórmula de, XXI.12

Chamizo, J. A., XVIII.3

Dalgarno, A., XIV.25
Darwin, término de, XV.14
de Broglie, L., II.3
de Broglie
longitud de onda de, I.9, II.1–II.4, II.8, II.9, II.10
expresión relativista, II.7, II.8
onda de, IV.12
y relatividad galileana, V.15
decaimiento beta, XIV.23, XVIII.8
decoherencia, XXI.24
degeneración, I.13, VI.8, VIII.13, VIII.18, VIII.23, IX.20, XIII.10, XIII.17, XIII.28, XIV.11–XIV.13, XVI.3, XVI.7, XVI.10, XVI.11, XXII.8
de intercambio, XVI.7
orden de la, XI.10, XIII.10, XVIII.6
de la Peña, L., XXIII.12
delta de Dirac, II.5, IV.1, IV.2, IV.4–IV.6, V.11, XVII.5, XXI.16, XXIV.4
como potencial modelo, V.2, VI.3, VI.15, VI.16, X.4, XIII.36
coeficientes de transmisión y reflexión, VI.15
estados ligados, X.4
representación momental, X.4
en coordenadas polares, IV.5
en coordenadas polares esféricas, IV.6
propiedades, IV.1
y funciones de Bessel, XIII.27
densidad
de carga eléctrica, XI.11
de corriente, V.6, V.9, V.16, XIII.18, XV.17
de espín, XV.17
de flujo, V.6, VI.18, XX.20
en un campo electromagnético, IX.23
y transformación de norma, IX.23
de flujo incidente, XX.20
de partículas, II.5, II.6, V.7, V.10
en un pozo rectangular, III.4
y transformación de norma, IX.23
de probabilidad, III.8, V.11, V.12
átomo hidrogenoide, XIII.11
campo electromagnético, XV.17
límite clásico, V.11
oscilador armónico, XI.30
espectral, XVII.27
de un cuerpo negro, I.1, I.2, I.3
del campo de punto cero, XXIII.2, XXIII.11
del campo de radiación, XXIII.1, XXIII.3
local de partículas, VI.18
descenso, operador de, v. operadores
descripción
de Heisenberg, IX.10, IX.11, X.16, XVII.25
de interacción, XVII.25
de Schrödinger, IX.10, XVII.25
y ecuación de evolución, IX.11
desdoblamiento por intercambio, XVI.3
desfasamientos, XIII.25, XX.8, XX.11, XX.12, XX.14, XX.15, XX.17, XX.27
por un potencial central, XX.31
desigualdades de Heisenberg, VIII.15, VIII.16, VIII.20
a tiempos diferentes, IX.13
oscilador armónico, IX.14, XI.5, XI.8, XI.23, XI.26
para potencial arbitrario, IX.14
y átomo helioide, XVIII.9
y dispersión de la posición, IX.13
y dispersión del momento, IX.13
y momento angular, XII.22
y pozo rectangular infinito, VIII.15
d'Espagnat, B., XXI.21
desviación cuadrática media, VIII.20
deuterón, XIII.24, XIII.32, XX.9,

xx.28
energía de amarre, xx.18
estado base, xiii.32, xx.9
diadas, x.6
diamagnético, momento, xiii.19
Dieks, D., v.14
difusión
coeficiente de, xxiii.9
ecuación de, xxiii.9
Dirac, P.A.M., xxii.16
Dirac
delta de, v. delta de Dirac
ecuación de,
espinores, xxii.13
para partícula en un campo eléctrico, xxii.14
para partícula en un campo magnético, xxii.17
para partícula libre, xxii.10
para problema central, xxii.5, xxii.7
y átomo hidrogenoide, xxii.8
y neutrinos, xxii.19
hamiltoniano de, xxii.5, xxii.20
con acoplamiento minimal, xxii.11
para partícula libre, xxii.9
paridad del, xxii.18
matrices de, xxii.2, xxii.17, xxii.20
notación de, viii.4, viii.13, viii.19
operadores de, xxii.19
disociación, x.4, xix.10
energía de, xix.7, xix.10
dispersión (variancia), iii.9
de la energía, i.21
de la posición, iii.6, viii.15
oscilador armónico, xi.3, xi.7, xi.8, xvii.3, xi.26
paquete minimal de electrones, viii.21, xi.7
de la velocidad
paquete minimal de electrones, viii.21
de un operador hermitiano, viii.14
de un paquete, ii.6, xi.3
del momento lineal, iii.6, viii.15
oscilador armónico, xi.8, xi.26, xvii.3
para fuerza constante, ix.22
estados de mínima, xi.3, xi.27, xx.19
por un potencial unidimensional, vi.9
dispersión (difusión)
ángulo de, xx.7
amplitud de, xx.7, xx.11, xx.12, xx.17, xx.18, xx.23, xx.26, xx.28, xx.29
de Compton, i.9, i.18
de neutrones, xx.12
de protones, xx.11
de Rutherford, xx.11
de un fotón, i.11
deuterón-deuterón, xx.28
elástica, xx.2, xx.15, xx.16, xx.26, xx.28, xx.30
hacia atras, xx.11
inelástica, xx.17
por potencial coulombiano, xx.21
por un pozo rectangular unidimensional, vi.10
por una barrera esférica, xx.7
por una esfera rígida, xx.20
protón-neutrón, xx.18, xx.29
sección diferencial de, xx.2, xx.7, xx.11, xx.12, xx.24, xx.25, xx.27, xx.28
partículas con estructura, xx.10
sección total de, xx.8, xx.12, xx.16
distribución
angular de partículas blanco, xx.5
de Planck, i.1, i.2, xxi.10
de Poisson, xvii.12
de Rayleigh y Jeans, i.1
de Wien, i.1
de Wigner, xxi.32, xxiii.6
espacial uniforme, v.9
gaussiana , v. distribución normal
lorentziana, iii.2
normal, ii.5, ii.6, iii.2, iv.3, v.10, viii.17, xi.2, xi.7

anchura, v.10, v.11, xxiii.7
uniforme, ii.5, xxi.16
doblete, xii.26, xii.39, xii.44, xv.15
Doppler, efecto, xvii.27
Dupont-Roc, J., xvii.29

ecuación
de Abraham y Lorentz, xxiii.4
de Braffort y Marshall, xxiii.4
de Dirac
para partícula en un campo magnético, xxii.12
para potencial central, xxii.7
soluciones para partícula libre, xxii.10
y neutrinos, xxii.19
de Langevin, xxiii.4
de von Neumann, xxi.20
ecuación de continuidad, v.1, v.6, v.16, vi.18, ix.23, xv.17, xxiii.8, xxiii.9
partícula en un campo electromagnético, ix.23
y potencial complejo, v.1
y transformación de norma, ix.23
ecuaciones de Heisenberg, ix.5, xvii.29
Edmonds, A. R., xii.30
efecto Compton, i.8, i.11
efecto fotoeléctrico, i.7, i.11, xvii.31
y correcciones relativistas, i.17
efecto túnel, vi.7, vi.18, vii.11
efectos cuadráticos
del campo magnético, xiii.19
efectos relativistas, xv.14
Ehrenfest, teorema de, iv.8, ix.21, ix.22
y campo magnético externo, ix.6
eigenfunciones
comunes, viii.13, ix.20, xiii.28
ortogonalidad, iii.3
oscilador armónico, xi.9
pozo infinito
continuidad de la derivada, v.2
eigenvalores, iv.10
partícula en un campo magnético, xii.41
problema de, iii.3
eigenvectores comunes, ix.20
Einstein
coeficiente A, xvii.15, xvii.27
coeficiente B, xvii.14, xvii.27
coeficientes de, xii.32, xiii.6, xiii.21, xiv.12
eje de rotación, xii.34
electrodinámica cuántica, xvii.29
electrodinámica estocástica, xxiii.3, xxiii.4, xxiii.6, xxiii.12
lineal, xxiii.12
emisión
espontánea, xvii.15
inducida, xvii.14
por molécula diatómica, xix.9
empate de soluciones, v.2
energía
absorbida en una colisión, xx.3
cinética
átomo hidrogenoide, xiii.31
corrección relativista, xv.12, xv.14
cinética relativista, ii.9
correcciones a segundo orden, xiv.1
de amarre, xxii.1
del deuterón, xx.18
de disociación, x.4, xix.7, xix.10
del ión de helio, xviii.3
de interacción, xvii.9, xviii.12, xix.14
de intercambio, xvi.3
de ionización, xviii.3
de retroceso, i.10
de un cuanto, i.6
del punto cero, i.21, xxi.10, xxiii.2, xxiii.11
de la molécula de hidrógeno, xix.2, xix.3
de un cuerpo negro, i.2
dispersión de la, i.21
electrónica, xix.5–xix.7, xix.10
espectro para molécula diatómica, xix.10
fluctuaciones de la, i.21
media, i.21
de polarización, xviii.5

de un ensemble canónico de osciladores, XXI.10
niveles, partícula en campo gravitatorio, I.20
positiva, V.17
relativista, II.7, II.8, V.17
rotacional, XIX.6, XIX.10
vibracional, XIX.6, XIX.10, XIX.11
enlace, potencial de, XIX.4
ensemble, II.3
de estados puros, XXI.3
de osciladores armónicos, XXI.10
canónico
de osciladores armónicos, XXI.11, XXI.13
Epstein, J., XIV.8
equilibrio estadístico, XXIII.1
escalón de potencial, VI.12, VI.20
coeficientes de transmisión y reflexión, VI.12, VI.20
espacio fase, VII.9
espectro
de absorción, XIX.9
continuo, X.1, X.14
continuo no acotado, X.14
de emisión, I.14, I.15, XIX.9
de energía, molécula diatómica, XIX.10
de potencia, XXIII.3
de un operador, IX.9, X.1, XXI.4
y transformaciones unitarias, XXI.4
discreto, X.1
rotacional de molécula diatómica, XIX.10
vibracional de molécula diatómica, XIX.10
espín
acoplamiento espín-órbita, XII.24, XV.14
relaciones de conmutación, XV.1
valor medio, XII.41
valores propios, XII.38
y campo magnético, XV.18, XV.19
espinor del neutrino, XXII.19
espinores, XV.6–XV.8, XV.10, XV.17
esféricos, XXII.6
estabilidad del atómo, XXIII.2, XXIII.11
estabilidad de las órbitas de Bohr, I.12
estado resonante, XX.27
estados
antisimétricos, XVI.12
coherentes, XI.3, XI.28, XIII.34
oscilador armónico, XI.27, XI.29
de dispersión, XX.19
enredados, XII.28
entrantes, XX.15, XX.19
estacionarios, III.4, V.7, XIII.33
átomo hidrogenoide, XIII.31
ligados, XIII.36, XVII.6, XVII.7, XX.13, XXII.7
deuterón, XIII.24
puros, XXI.2–XXI.8, XXI.20, XXI.21, XXI.24, XXI.26
ensemble de, XXI.3
evolución, XXI.24
matriz de densidad, XXI.3
y distribución de Wigner, XXI.32
y mezclas, XXI.24, XXI.25
salientes, XX.15, XX.19
simétricos, XVI.12
estocásticos, métodos, XXIII.6
estructura fina, constante de, XIII.23, XVIII.7, XXIV.1
estructura hiperfina, XIV.26
Euler,
ángulos de, XII.37
fórmula de, XII.40
evolución
de la matriz de densidad, XXI.20
operador de, XVII.25, XXI.24
excentricidad, XIII.11, XIII.12
vector de, XIII.12
excitación, probabilidad de, XVIII.8

factor de forma, XX.10
fase
de Condon y Shortley, XII.3
de la función de onda, V.6
fases
de Berry, IX.24
de Hannay, IX.24
fermi (unidad), XXIV.1

fermión masivo, XXII.20
fermiones, XVI.4, XVI.9, XXII.16
Ferreira, E. M., IX.19
Feynman, R. P., V.3, XXI.22
Feynman, propagador de, IV.8, XI.20, XI.21, XI.25, XXI.18
Feynman y Hellman, fórmula de, VI.14, XIII.13, XIII.37
fluctuaciones, v. también dispersión
  de la energía, I.21
    gas ideal, I.21
flujo
  de partículas, VI.18, XIII.37
  estacionario, VI.18
  de probabilidad, VI.12
  incidente, XX.23
  magnético, IX.24
    cuantización, IX.25
  radial, XX.15
  sistemático, XXIII.9
fluorescencia, XVII.27
Focault, péndulo de, IX.24
Fokker y Planck, ecuación de, XXIII.9
Foldy y Wouthuysen
  representación de, XXII.15
  transformación de, XXII.15
fotón
  absorción de un, I.11
  dispersión de un, I.11
  emisión de un, I.10
  masa efectiva, II.8
  momento angular, XII.32
fotoeléctrico, efecto, I.17, XVII.31
fotoelectrones, I.7, I.17
Fourier
  coeficientes de, III.1
  serie de, III.1
  transformada de, III.2, IV.9
Franck y Condon, principio de, XIX.5
frecuencia
  de Bohr, XV.22
  de ciclotrón, XV.16, XV.18
  de corte, I.4
  de Larmor, XV.19
  de radiación, I.19
  de resonancia, XV.20
  de transición, V.7, VI.17, XXII.8
frecuencias normales, XI.22
frenado, efecto de, VI.18
Fresnel,
  función coseno, III.4
  integrales de, IV.10
fuerza
  alcance, XIII.32
  central, I.13
  externa constante, V.9
  sobre las paredes de un pozo de potencial, VI.14
función
  de autocorrelación, oscilador armónico, XXIII.5
  de Green, V.3
    oscilador armónico, XI.25
  de onda
    colapso, XXI.24
    continuidad, V.2, VI.3, VI.15
    continuidad de su derivada, V.2, VI.3, VI.15
    entrante, VI.18
    evolución, V.12
  hidrogenoide, XIII.11
    leyes de transformación, X.1
    normalización, II.5, III.4, V.8, V.12
    para delta de Dirac. v. delta de Dirac
    paridad, VI.2, IX.1, X.2
    pequeña, XXII.17
    radial, átomo hidrogenoide, XIII.16
    radial, normalización, XIII.8
    representación de momentos, X.19
    totalmente antisimétrica, XVI.2, XVI.4, XVI.9
    totalmente simétrica, XVI.2, XVI.4, XVI.7, XVI.9
    y transformaciones de norma, IX.7, IX.23
    y transformaciones galileanas, V.14, V.15, X.19
  de partición, I.4, XXI.10, XXI.11, XXIII.7
  de prueba, XVII.2–XVII.5, XVII.7, XVII.17, XVII.19, XVIII.3
  de Wigner, XXI.32
función de trabajo, I.7, I.17, XVII.31

del aluminio, I.17
del potasio, I.7
funciones propias, v. eigenfunciones

Galileo, transformación de, V.14, V.15, X.19
y función de onda, X.19
Galindo, A., VI.4, VII.12, XI.21, XII.36, XIII.35, XVI.11, XX.28
García-Colín, L., I.2
Garritz, A., XVIII.3
gas ideal, I.21
Gasiorowicz, S., XIII.8
gato de Schrödinger, XII.28
Gauss, teorema de, XXIII.8
Glauber, fórmula de, XI.31
Goldman, I. I., XVIII.12
Goldstein, H., I.13, I.14, X.6, XIII.12
Gordon, W., XIV.12
Gradshteyn, I. S., I.2, III.4, X.5, XI.20, XIII.33, XVII.3
Gramm y Schmidt, procedimiento de diagonalización de, III.5, VIII.13
Green
función de, v. propagador, IV.8 V.3, VIII.19, XX.22
del oscilador armónico, XI.25
operador de, VIII.19
Greenberg, D. F., XII.33
grupo de rotaciones, XII.42
Grynberg, G., XVII.29
guía de ondas, IV.13

hamiltoniano
conmutación con el, XIII.28
de Dirac, XXII.5, XXII.9, XXII.11, XXII.18, XXII.20
eigenfunciones, VIII.4
hermiticidad, VIII.4
partícula en un campo magnético, XV.16
Hamilton y Jacobi, ecuación de, V.16
Hannay, fases de, IX.24
hartree (unidad), XVIII.7
Hartree y Fock
ecuación de, XVII.8
método de, XVII.8, XVII.28, XVIII.11
para dos osciladores acoplados, XVII.28
Hauge, E. H., VI.18
Heaviside, función de, IV.1
Heisenberg, W., XXIII.12
Heisenberg
descripción de, IX.10, X.16, XVII.25
desigualdades de, VIII.15, VIII.16, VIII.20, XI.8
a tiempos diferentes, IX.13
oscilador armónico, IX.14, XI.5, XI.23, XI.26
y átomo helioide, XVIII.9
y dispersión de la posición, IX.13
y dispersión del momento, IX.13
y momento angular, XII.22
ecuaciones de, IX.5, IX.6, IX.16, IX.17, IX.22, XIII.1, XV.22, XVII.25, XVII.26, XVII.29, XVII.30, XXII.4, XXII.11
oscilador armónico, XI.23
para fuerza constante, IX.22
helicidad, operador de, XXII.19, XXII.20
helio, XIII.32
Hibbs, A. R., V.3
Hilbert, espacio de, VIII.18, VIII.25, X.9, X.15, XII.31, XVI.14
bidimensional, XII.40, XV.22, XVII.29, XXI.7
isométrico, XVI.14
Hill, R. N., IX.21
Hylleraas, potencial de, VII.3, VII.10
coeficiente de transmisión, VII.3, VII.10

idempotencia, VIII.18, XXI.4
índice de refracción, VI.20
integrales de movimiento, XV.16
intensidad
dinámica, XIV.12
estadística, XIV.12
interacción, XX.10, XX.11,
cuadrupolo-cuadrupolo, XVII.9
descripción de, XVII.25
dipolar eléctrica, XVII.9
dipolo-cuadrupolo, XVII.9

energía de, XVII.9, XVIII.12, XIX.14
espín-espín, XV.21
fuerte, XII.44, XX.30
protón-neutrón, XIII.32, XX.9
intercambio
degeneración de, XVI.7
desdoblamiento por, XVI.3
energía de, XVI.3
operador de, XVI.1, XVI.4, XVI.5, XVI.7, XVI.14
interpretación
de Copenhague, XVII.9
de ensemble, XVII.9
invariancia de Galileo, V.14, V.15,
y fórmula de de Broglie, V.15
inversión de coordenadas, VI.10, XVI.13
ión helioide, XVIII.3
ionización, probabilidad de, XVIII.8
isoespín, XII.44, XX.30

Jackson, J. D., I.12, XV.18
Jacobi, identidad de, VIII.5, IX.2
Jaynes y Cummings, modelo de, XVII.30
Johnson, Ch. S., XX.1
Jordan, P., XXIII.12
Josephson, junta de, IX.24

Kepler
problema de, I.13, XII.8, XIII.12, XX.21
tercera ley de, XXIII.2
Khare, A. V., XIV.4
Klein y Gordon, ecuación de, V.17, XXII.1
y conservación de partículas, XXII.16
para potencial isotrópico, XXII.1
Kobe, D. H., XVII.28
Knight, R. E., XVIII.12
Kramers, H. A., XIII.35
Kramers, relación de, XIII.14
Krivchenkov, V. D., XVIII.12
Kronig y Penney, modelo de, VI.3
Kummer, ecuación de, XIII.9

Lamb, W. E., XVII.31
Landau, L. D., XIII.8, XIII.17, XIV.8, XXII.12
Landauer, R., VI.18
Landé, A., V.15
Langevin, ecuación de, XXIII.4
Langhoff, P. W., V.13
Laplace-Runge-Lenz, vector de, XIII.12
Larmor
fórmula de, I.12, XV.16, XXIII.1
frecuencia de, XV.18, XV.19
radiación de, XXIII.4
Latham, W. P., XVII.28
Lebedev, N. N., XXI.13
Lebesgue, integral de, X.15
Lévy-Leblond, J. M., V.15, XIII.13, XIII.37
Lie, semigrupo de, XII.11
Lifshitz, E. M., XIII.8, XIII.17, XIV.8, XXII.12
límite
clásico, II.9
no relativista, XXII.13
ultrarrelativista, II.9
Liouville, ecuación de, XVII.25
Lippmann y Schwinger, ecuaciones de, XX.19
Lorentz, fuerza de, XXII.11
expresión cuántica, IX.6
Loudon, R., XVII.27, XXI.31

Mandel, L., XVII.31
Mark, XIV.12
Marsden, J., I.13
Martin, Th., VI.18
masa
en reposo, II.8
reducida, XII.4, XV.12, XVIII.2
relativista, II.8
matrices gamma, XXII.3
matriz
adjunta, VI.9, VI.10
de transferencia, VI.10
hermitiana, XXI.6
idempotente, XXI.2, XXI.5, XXI.8
representación diagonal, XXI.2
unitaria, VI.9
matriz de densidad, capítulo 21
átomo en un campo de radiación, XXI.31
coherencias, XXI.3

de estados puros, XXI.4, XXI.8, XXI.24
de partícula libre, XXI.16–XXI.18
de una mezcla, XXI.4
en la descripción de interacción, XXI.22
en la representación de momentos, XXI.17
ensemble de osciladores, XXI.10, XXI.13–XXI.15
canónico, XXI.13
evolución, XXI.20
global, XXI.29
no normalizada, XXI.13, XXI.14, XXI.18, XXI.27
partícula en un campo magnético, XXI.28
partícula en una caja, XXI.27
poblaciones, XXI.3
promedio, XXI.3
reducida, XXI.21
representación de coordenadas, XXI.27
y teoría de perturbaciones, XXI.22
matriz de dispersión, VI.9, VI.10, XX.15
pozo rectangular finito con barrera infinita, VI.11
mecánica cuántica estocástica, XXIII.10
matriz S, v. matriz de dispersión
Merzbacher, E., XIII.8
Messiah, A., XIII.8
metales alcalinos, XVIII.1
método dimensional, VIII.16
método variacional
de Hartree y Fock, XVII.8
rotor rígido en un campo gravitatorio, XVII.4
y átomo de hidrógeno, XVII.17
y átomo de litio, XVIII.12
y barrera impenetrable, XVII.19
y energía de un estado excitado, XVII.2
y oscilador armónico, XVII.2, XVII.3
y oscilador armónico truncado, XVII.6
y potencial atractivo, XVII.7
y potencial de Yukawa, XVII.5
y quarkonio, XVII.20
y teoría de perturbaciones, XVII.1
método WKB
rango de validez, VII.3
y átomo hidrogenoide, XIII.35
y coeficiente de transmisión, VII.1
y corrimientos de fase, XX.31
y cuantización de la energía, VII.2, VII.4, VII.5, VII.8, VII.12, XIII.35
en un campo gravitatorio, VII.5
y efecto Stark, XIV.8
y oscilador armónico truncado, XVII.6
y potencial de Hylleraas, VII.3
y pozo unidimensional, VII.4, VII.6
eigenvalores, VII.6
y pozo tridimensional, VII.6
y reglas de cuantización en varias dimensiones, VII.6
y rotor rígido en un campo gravitatorio, XVII.4
y solución de ecuaciones diferenciales, VII.7
y vida media, VII.14
métodos estocásticos, XXIII.6
mezcla, XXI.3, XXI.4, XXI.7, XXI.9, XXI.23–XXI.26, XXI.30
de primera clase, XXI.21
de segunda clase, XXI.21
incoherencia, XXI.25
propia, XXI.21
Milonni, P. W., XVII.29, XVII.30
modelo de capas, XVIII.6
modos normales, XI.22, XIV.17, XIV.18, XVI.6
molécula
de HCl, XIX.9
de LiH, XIX.8
de hidrógeno, XIX.1, XIX.3, XIX.4
energía, XIX.2, XIX.3
diatómica, XIII.4, XIII.29, XIX.6, XIX.7

espectro de emisión, XIX.9
espectro rotacional, XIX.10
espectro vibracional, XIX.10
heteronuclear, XIX.13
momento dipolar eléctrico, XIX.13
y campo gravitatorio, XIII.4
y campo eléctrico, XIII.4
momento
canónico conjugado, XII.7
cuadrupolar eléctrico, XVII.15
diamagnético, XIII.19
dipolar, XII.32
dipolar eléctrico, XIX.13
molécula diatómica, XIX.13
magnético, XIII.18, XXI.12
y momento angular, XIII.18
radial, XII.6, XII.8
relativo, XII.4
momento angular
adición de, XV.15
componentes, XII.22
coordenadas relativa y de CM, XII.4, XII.5
cuantización, XIII.33
del fotón, XII.32
eigenvalores y eigenfunciones, IX.1, XIII.26, XIII.30
operador de, XII.1, XIII.26, XV.16
en coordenadas cartesianas, XII.2
en coordenadas esféricas, XII.2
para sistema de dos partículas, XII.4
elementos de matriz, XII.13
hermiticidad, XII.1
y operador de momento lineal, XV.16
operador de ascenso, XII.11, XII.13, XII.35, XIII.30
operador de descenso, XII.11, XII.13, XII.35, XIII.30
radiado, XII.32
relación del triángulo, XII.30
relaciones de conmutación, XII.5, XII.9, XV.1, XII.10, XII.12, XII.35
representación matricial, XII.19, XII.21, XII.43
total, XV.1, XII.24, XV.11
y desigualdades de Heisenberg, XII.22
y estabilidad del sistema, VII.14
y momento lineal, XII.9
y momento magnético, XIII.18
y paridad, IX.1
Morse, P. M., XXI.13
Morse, potencial de, XIII.29, XIX.7
espectro, XIII.29
operadores de ascenso y descenso, XIII.29
movimiento orbital, XIII.20, XIII.37
movimiento radial, XIII.31
movimiento relativo, XX.1

Neumann von, ecuación de, XXI.20, XXI.24
neutrino del electrón, XXII.19
Newton, R. G., XX.31
Nienhuis, G., V.14
norma de Coulomb, XVII.29
normalización, XI.2
de la función de onda, II.5, III.4
núcleo extenso, XIV.26, XV.13
nucleones, XII.44
número cuántico, I.13, XIII.30, XIV.6
rotacional, XIX.6
vibracional, XIX.6
números mágicos, XVIII.6

observable, X.16
ocupación, XIV.12, XVII.15
onda rotatoria, XVII.27
onda *p*, XX.8
onda *s*, XIII.25, XX.8, XX.11, XX.18, XX.26, XX.27
ondas parciales, XX.26
operador, v. también operadores
cronológico, XVII.25
de aniquilación, XIII.34
de carga, VIII.2
de Casimir, XII.11
de conjugación de carga, VIII.28
de Green, VIII.19
de densidad
evolución, XXI.29
global, XXI.29
reducido, XXI.29
de descenso, XVII.29

átomo hidrogenoide, XIII.29
atómico, XV.22
de momento angular, XII.11, XII.13, XII.35, XXII.5
en la representación de Foldy y Wouthyusen, XXII.15
de momento angular total, XXII.5
de posición en la representación de Foldy y Wouthyusen, XXII.15
potencial de Morse, XIII.29
de energía cinética, IX.5, XIII.5, XIII.31
de evolución, IX.10, XI.29, XII.40, XVII.24, XVII.25, XXI.24
de helicidad, XXII.19
impar, XXII.18
par, XXII.18
de momento lineal, III.7, XV.16
en la representación de Foldy y Wouthyusen, XXII.15
relaciones de conmutación, XV.16
de paridad, IX.1, VIII.24, XXII.18
hermiticidad, VIII.24
valores propios, VIII.24
de polarización circular, XIII.33
de posición
elementos de matriz, XI.6
evolución temporal, IX.16
valor medio, II.5
de rotación, XV.5, XV.7, XII.34, XII.37, XVII.24
de rotación de un cuerpo rígido, XII.42
de traslación espacial, VIII.25, X.14
de velocidad, IX.22
para fuerza constante, IX.22
relaciones de conmutación, XV.16
y operador de momento, XV.16
elementos de matriz, X.6
espectro de un, y transformaciones unitarias, IX.9, XXI.4
exponencial, XI.17, XI.31
y matrices de Pauli, XV.3
representación de un, VIII.10
representación matricial, X.6
representación propia, VIII.12
serie de potencias de un, VIII.6
traza, X.6, X.7
operadores
canónicos conjugados, VIII.5
conmutación, VIII.1, VIII.7
de acoplamiento espín-órbita, XXII.5
de aniquilación, XI.8, XI.12–XI.14, XI.18, XIII.33, XXI.11
estados propios, XI.19
representación matricial, XI.15
de ascenso, v. también de creación, XVII.29
átomo hidrogenoide, XIII.29
atómico, XV.22
momento angular, XII.11, XII.13, XII.35
para el espín, XII.15
potencial de Morse, XIII.29
de campo, XVII.29
de creación, XI.8, XI.12–XI.14, XI.18, XIII.33, XXI.11
funciones propias, XI.24
representación del, XI.21
representación matricial, XI.15
de espín, XV.6, XV.11, XXII.5
en la representación de Foldy y Wouthyusen, XXII.15
de helicidad, XXII.20
de intercambio, XVI.1, XVI.4, XVI.5, XVI.7, XVI.14
de momento angular, IX.1, XII.1, XIII.26, XV.11
coordenadas relativas y de CM, XII.4, XII.5
en coordenadas cartesianas, XII.2
en coordenadas esféricas, XII.2
hermiticidad, XII.1
para sistema de dos partículas, XII.4
total, XV.11
de número, XII.35

de proyección, VIII.18, X.5–X.7, X.11, XII.39, XVI.2, XXI.7, XXI.23
hermitianos, VIII.1–VIII.4, VIII.26, XVI.1
construcción de, VIII.3
idempotentes, VIII.18, X.6, XII.11, XXI.7
lineales, VIII.19, VIII.23
unitarios VIII.1, VIII.2, IX.9, X.14, X.19, XXII.10, XXII.11
de una partícula, XXII.18
orbital hidrogenoide, XVIII.11
orbitales moleculares, XIX.3, XIX.13
órbitas
circulares, I.14, I.19, XII.8, XXIII.11
átomo hidrogenoide, XIII.12
problema de Kepler, XII.8, XXIII.11
elípticas, I.13
átomo hidrogenoide, XIII.12
estabilidad, I.12, XXIII.2, XXIII.11
orden de dos operadores, XXIII.10
oscilador anarmónico, XIV.1
dispersión de la posición, XIV.1
dispersión del momento, XIV.1
tratamiento perturbativo, XIV.1, XIV.20,
oscilador armónico, capítulo XI
cargado, XXIII.1
clásico, XI.11
densidad espectral, XXIII.7
degeneración, XIII.10
desigualdades de Heisenberg, IX.14, XI.23, XI.26
dispersión de la energía del estado base, XXIII.6
dispersión de la posición, XVII.3, XI.26, XI.27, XXIII.5
dispersión del momento, XVII.3, XI.26, XI.27
en el campo de punto cero, XXIII.4
en un campo de radiación, XXIII.7
ecuación de onda radial, XIII.10
eigenfunciones, XI.9
eigenfunciones y eigenvalores, XIV.1, XVI.5, XVI.9
eigenvalores, XIII.10
en un campo eléctrico pulsante, XVII.21
en un campo eléctrico uniforme, XVII.12
energía cinética, XI.6
energía del estado base, XVII.2, XVII.3
estado base, XI.8
variancias, XI.7
estados coherentes, XI.3, XI.27, XI.29
función de autocorrelación, XXIII.5
función de Green, XI.25
isotrópico bidimensional, XIII.33, XIII.34
eigenvalores y eigenfunciones, XIII.33
estados coherentes, XIII.34
estados estacionarios, XIII.33
operador de momento
elementos de matriz, XI.6, XI.16
operador de posición
elementos de matriz, XI.6, XI.14, XI.16
paquete minimal, XI.9, XI.29
potencia radiada, XXIII.1
propagador, XI.20, XI.21, XI.25
reglas de selección, XVII.16
representación de momentos, XI.30
solución radial, XIII.9, XIII.10
tridimensional, XI.10, XIII.10, XV.14, XVIII.6
degeneración, XI.10, XVIII.6
efectos relativistas, XV.14
truncado, XVII.6
energía del estado base, XVII.6
estados ligados, XVII.6
y método WKB, XVII.6
y método variacional, XVII.6
y método variacional, XVII.2
y péndulo cuántico, XIV.4
osciladores armónicos
acoplados, XIV.18
cuatro acoplados, XVI.9
de Planck, I.4

dos acoplados, XI.22, XIII.5, XIV.14, XVI.5, XVII.28
con potencial gaussiano, XIV.20, XVI.8
eigenvalores, XIV.20
espectro de emisión, XIV.19
espectro de energía, XIII.5
funciones de onda, XIV.17
teoría de perturbaciones, XIV.14, XIV.15, XIV.18, XIV.20
y método de Hartree y Fock, XVII.28
dos independientes, XI.31
eigenfunciones y eigenvalores, XXI.13
energía del estado base, XXIII.1
energía mínima, XI.5
ensemble de, XXI.10, XXI.13–XXI.15
estado base, XI.7
hamiltoniano, XXI.10
paquete de, XI.1, XI.3, XI.4
dispersión de la posición, XI.3
dispersión del momento, XI.3
representación del operador de creación, XI.21, XI.24
teorema del virial, XI.6
tres acoplados, XVI.6, XVI.7
y método variacional, XVII.2

paquete
anchura media, V.10
coherente, XI.5
coherente de osciladores, XI.1
de mínima dispersión, VIII.17, XI.3
ecuación diferencial, VIII.17
de ondas, III.2
de osciladores armónicos, XI.1–XI.3
dispersión de la posición, XI.3, XI.4
dispersión del momento, XI.3
de partículas libres, IV.8
evolución, IV.10
momento medio, IV.8
propagación, IV.11
velocidad promedio, IV.8
en un campo constante, V.8
gaussiano (normal), VIII.21, XI.1, XI.9
mínima energía, XI.5
minimal, VIII.21, XI.7
oscilador armónico, XI.9, XI.29
y estados coherentes, XI.28
paramagnetismo, XIII.19
parámetro de impacto, XX.6, XX.20
paridad, v. también inversión de coordenadas, VI.2, IX.1, XI.20
operador de, IX.1, VIII.24
partícula
de Dirac en un campo eléctrico, XXII.14
en dos campos magnéticos, XVII.24
en un campo de fuerzas uniforme, X.18
representación de coordenadas, X.18
representación momental, X.18
en un campo electromagnético, IX.7, XXII.1, XXII.11
ecuaciones de movimiento, XXII.11
en un campo gravitatorio, I.20, VII.5
eigenfunciones, VII.5
eigenvalores, VII.5
en un campo magnético, XII.41, XV.9, XV.10, XV.16, XXI.28
matriz de densidad, XXI.28
y teoría de Dirac, XXII.17
hamiltoniano de Dirac, XXII.9
libre, V.17, XIII.3, XX.14
ecuación de Pauli, XV.8
energía, IV.7, V.17
evolución, IV.10
hamiltoniano de Dirac, XXII.9
haz de, IV.9
matriz de densidad en la representación de momentos, XXI.17
paquete de, IV.8, IV.11
propagador, XXI.18
y fuerza constante, IX.22
Pascual, P., VI.4, VII.12, XII.36, XIII.35, XVI.11, XX.28

Pauli
ecuación de, XV.8, XV.9, XV.17, XV.18, XV.22
función de onda de, XV.10
matrices de, XII.14–XII.17, XII.20, XV.2, XV.6, XV.9, XV.22, XXI.6, XXI.28, XXII.2, XXII.5, XXII.9, XXII.10
hermiticidad, XII.14
propiedades, XV.2–XV.4
propiedades de anticonmutación, XII.15, XII.16
relaciones de conmutación, XV.5
y operador exponencial, XV.3
teorema fundamental de, XXII.3
Pedersen, L. G., XX.1
péndulo
cuántico, XIV.4
de Focault, IX.24
permutación, XVI.4, XVI.13, XVI.14
perturbación
adiabática, XVII.10
impulsiva, XVII.11
perturbaciones
dependientes del tiempo, XVII.15, XVII.27
regla de oro, XX.23
probabilidad de transición, XVII.11–XVII.13, XVII.15, XVII.21–XVII.23
rango de aplicabilidad, XVII.13
teoría estacionaria, XIV.1, XIV.22
a quinto orden, XIV.25
de sistemas degenerados, XVI.3, XIV.16, XX.14
efecto Stark, XIV.4
efecto Zeeman normal, XIV.5
osciladores acoplados, XIV.14, XIV.15, XIV.18
primer orden, XIV.1–XIV.4, XIV.18, XIV.20, XIV.23, XV.13
segundo orden, XIV.1, XIV.3, XIV.13
sistemas degenerados, XIV.4, XIV.18
sistemas no degenerados, XIV.18, XVI.8
y fuerzas de van der Waals, XVII.9
y rotor rígido en un campo gravitatorio, XVII.4
y sección diferencial de dispersión, XX.23
Peshkin, M., IX.24
piones, XII.44
Planck, M., I.1, I.3
Planck
distribución de, I.1, I.2, XXI.10
fórmula de, XXIII.1
ley de, I.21
osciladores de, I.4
energí a media, I.4
primera teoría , I.1
poder absorbente, I.3
Pochhammer, símbolos de, XIII.9
Poisson
distribución de, XVII.12
paréntesis de, IX.2
polarización, XII.36, XIV.12, XV.8, XVIII.5, XX.29, XXI.28, XXI.30
energía media de, XVIII.5
paralela, XIV.12
perpendicular, XIV.12
vector de, XXI.8, XXI.30
postulado
de cuantización, v. reglas de cuantización
de intercambio discreto de energía, I.21
potencia radiada, I.6, I.12, XXIII.2
oscilador clásico, XI.11
potencial
atractivo
número de estados, VII.9
y método WKB, XVII.7
y método variacional, XVII.7
centrífugo, VII.14
central, I.14, VII.14, XIII.36, XXII.5, XX.20, XX.31
coulombiano, XIII.7–XIII.17, XX.11, XX.21
ecuación de Dirac, XXII.5, XXII.7
cuántico, V.16

de Bohm, V.16
de Morse, XIX.7
de enlace, XIX.4
de perturbación hermitiano, XIV.21
de velocidad de flujo, V.6
efectivo, XIII.33, XVIII.11, XIX.11
electrónico, XIX.10
escalar, XXII.1
gaussiano, XVI.8
gravitatorio, VII.5
y método WKB, VII.5
y molécula diatómica, XIII.4
para movimiento nuclear, XIX.6
relativista, XXII.1
simétrico, XVI.3
pozo de potencial
asimétrico, VI.2
cilíndrico, VII.13
doble, VI.6
coeficientes de transmisión y reflexión, VI.7
esférico, VII.14, XIII.25, XX.8, XX.9, XX.13, XXI.27
estados ligados, XX.13
rectangular, II.10, III.4, VI.1, VII.6, VIII.15, X.17
coeficientes de transmisión y reflexión, VI.4
con barrera infinita, VI.11
densidad de partículas, III.4
dispersión de la posición, III.6, VIII.15
dispersión del momento, III.6, VIII.15
eigenfunciones, III.4, III.6–III.8, V.2, V.5, V.12, IX.15
eigenfunciones para profundidad infinita, VI.14, VI.17, VII.12
espectro de energía, V.12, VII.4, VII.6
estados ligados, VI.1
fuerza sobre las paredes, VI.14
número de estados, VI.1, VI.2
valor medio de la posición, VI.17
y método WKB, VII.4, VII.6
y relación de de Broglie, II.10
rectangular tridimensional, VI.8
degeneración de niveles, VI.8
eigenfunciones, VI.8
reglas de selección, XVII.16
simétrico, VI.2, VI.10
número de estados ligados, VI.2
tridimensional, espectro de la energía, VII.6
Pradhan, T., XIV.4
preaceleración, XXIII.4
presión de radiación, II.12
principio
de Franck y Condon, XIX.5
de acoplamiento minimal, XIII.19, XXII.1, XXII.5
de correspondencia, I.19
de reciprocidad, VI.12
probabilidad
amplitud de, XII.40
de emisión espontánea, XIV.12, XVII.15
de escape, VII.14
de excitación, XVIII.8
de excitación o ionización, XVII.23
de ionización, XVIII.8
de permanencia, VI.18
de transición, X.8, X.17, XI.20, XIII.21, XIV.12, XVII.11–XVII.13, XVII.15, XVII.16, XVII.21–XVII.24, XVII.26, XVII.27
átomo hidrogenoide, XIII.22
atómica dipolar, XVII.14
flujo de, VI.9
representación momental, X.17
problema de dos cuerpos, XX.1
proceso coloreado, XXIII.3
procesos difusivos cuánticos, XXIII.8
producción, XIV.12
producto tensorial, X.10
propagador, v. función de Green, IV.8, V.3, XI.20, XI.21, XI.25, XXI.18
causal, V.3
propiedad integral, V.4
de partícula libre, IV.8, XXI.18

del oscilador armónico, XI.20, XI.21, XI.25
representación del operador de creación, XI.21
proyectores, VIII.18, X.6, X.7, X.11, XII.18, XII.39, XVI.2, XXI.7, XXI.23
de espín 1/2, X.5
valores propios, VIII.18
pseudoescalar, XXII.19
punto cero, energía de, I.21, XXI.10, XXIII.2, XXIII.11

quarkonio, XVII.20
quarks, XVII.20
quiralidad, XXII.19

Rabi, I. I., XV.20, XV.22
Rabi, fórmula de, XV.22
radiación
de fondo, I.3, I.5
frecuencia de, I.19
presión de, II.12
Ramsauer y Towsend, efecto de, XX.8
Ramsey, N. F., XV.20
rango efectivo, aproximación de, XX.18
Rayleigh y Jeans, distribución de, I.1
Rayleigh y Ritz, método variacional de, XVII.7
reacción de radiación, XXIII.4
reflexión
coeficiente de, VI.4, VI.5, VI.7, VI.10, VI.12, VI.13, VI.15, VI.20
total, VI.20
regla de oro, XX.23
reglas
de Wilson y Sommerfeld, I.12–I.15, I.20, V.13, XVIII.5
de selección, XIII.21, XIV.12, XIV.19, XVII.16
angulares, XII.13, XVII.16
del oscilador armónico, XVII.16
del pozo de potencial, XVII.16
del rotor rígido, XVII.16
transición cuadrupolar, XVII.16
transiciones dipolares, XIII.21, XVII.16, XXII.8
y teoría de Dirac, XXII.8
de suma, IX.18, IX.19
regularización, XXIII.5
Reif, F., XXI.11, XXI.12
relación
de completez, V.3
de dispersión, IV.13
de recurrencia, XIII.14, XIII.15
giromagnética, XV.18, XV.20
representación
de coordenadas, VIII.10, VIII.29, XI.28
partícula en un campo de fuerza uniforme, X.18
y paridad, X.2
de Dirac y Pauli, XXII.2, XXII.20
y representación de Kramers y Weyl, XXII.3
de Foldy y Wouthyusen, XXII.15
de Majorana, XXII.2
de momentos, VIII.29, X.12
ecuación de Schrödinger, X.4
fuerza constante, X.17
función de onda, X.19
transformaciones galileanas, X.19
y matriz de densidad, XXI.17
y paridad, X.2
de Pauli y Dirac, XXII.17
diagonal, XXI.2
del operador de creación, XI.21, XI.24
irreducible, XII.28
paso de una a otra, X.1
quiral, XXII.19
repulsión, potencial efectivo, XVIII.11
resonancia, VI.13, XIII.25, XVII.31, XXIII.5
anchura, VI.13
magnética, XVII.24
resonancias N, XII.44
retardo, VI.19
retorno, puntos de, VII.4, VII.5, VII.8, VII.10, VII.12
retroceso, I.10
Riemann,
función zeta, I.2

integral de, x.15
rotación, operador de, xii.37, xii.42, xv.5, xv.7
rotor rígido, i.14, xiii.28, xiv.4
en un campo eléctrico uniforme, xiv.4
en un campo gravitatorio, xiv.3, xvii.4
y método WKB, xvii.4
y método variacional, xvii.4
reglas de selección, xvii.16
y péndulo cuántico, xiv.4
ruido
blanco, xxiii.2
coloreado, xxiii.4
Rutherford, E., xx.21
Rutherford
dispersión de, xx.11
modelo planetario de, xx.21
sección de, xx.21, xx.25
Rydberg, fórmula general de, xviii.5
constante de, xxiv.1
Ryzhik, I. M., i.2, iii.4, x.5, xi.20, xiii.33, xvii.3

Salpeter, E. E., xiv.8, xiv.11, xiv.12
Saxon, D. S., vii.3, xi.21, xi.24
Schiff, L., xiii.8
Schrödinger, E., xiv.12
Schrödinger
descripción de, ix.10, ix.11, xvii.25
ecuación de,
coordenadas relativa y CM, xiii.3
dependiente del tiempo, v.1
en la representación momental, x.4, xvii.19
estacionaria, iv.7
invariancia de Galileo, v.14
para un electrón excitado, xviii.11
para movimiento nuclear, xix.6, xix.10, xix.11
para movimiento relativo de N cuerpos, xviii.2
partícula en un campo gravitatorio, v.13
sistema de dos partículas, xiii.3
ecuación radial de, xx.14
Scully, M. O., xvii.31
sección
de dispersión elástica, xx.2, xx.7, xx.8, xx.10, xx.17, xx.29
de dispersión inelástica, xx.17
de Rutherford, xx.25
diferencial de dispersión, xx.2, xx.7, xx.10–xx.12, xx.20, xx.24, xx.25, xx.27, xx.28
y teoría de perturbaciones, xx.23
eficaz total, xx.6, xx.8, xx.9, xx.12, xx.16
segunda cuantización, xvii.29
separación de variables, coordenadas cilíndricas, vii.13
Sesma, J., ix.19
Shortley, G. H., xii.30, xiii.8, xiv.8
Silvert, W., viii.20
simetrización total, xvi.2
singulete, x.5, xii.28, xvi.10, xviii.10, xx.9, xx.29
sistema
atómico de unidades, xviii.7
de cuatro partículas iguales, xvi.9
de dos estados, xiv.22, xvii.13
de dos estados degenerados, xvii.10
de dos partículas, x.5, xii.4, xiii.3, xvi.10
energía cinética, xiii.5
de dos partículas iguales, xvi.3, xvi.8, xvi.12–xvi.14
de laboratorio, xx.1
de N electrones, xxi.21
de tres electrones, xii.39
de tres estados, xxi.9
de tres partículas, xv.15
de tres partículas iguales, xvi.4, xvi.6, xvi.7, xvi.11
del centro de masa, xx.1
internacional de unidades, xviii.7
sistemas
degenerados, xvi.3

lineales, VI.10
Slater
configuración de, XVIII.15
determinante de, XVI.9, XVIII.12
reglas de, XVIII.14
Smet, P., XXI.22
Snell, ley de, VI.20
squid, IX.24
Stark, efecto, XIV.4, XIV.11, XIV.13, XIV.25
cuadrático, XIV.8, XIV.9, XIV.10
dinámico, XXI.31
en coordenadas esféricas, XIV.11
en coordenadas parabólicas, XIV.8
lineal, XIV.7, XIV.8, XIV.12
y método WKB, XIV.8
y serie de Balmer, XIV.12
y teoría de perturbaciones a segundo orden, XIV.4
Stefan, J., I.2
Stefan y Boltzmann,
constante de, I.2
ley de, I.2
Stegun, A., IV.10, V.13, XIII.8, XVII.19
Stieltjes, integral de, IV.1
Stovneng, J. A., VI.18
Sudarshan, E. G. C., XVII.31
superposición, VI.17
coherente, XXI.32
incoherente, XXI.3
susceptibilidad
diamagnética, XIII.19
paramagnética, XXI.12

Telegdi, V. L., XII.33
término difusivo, XXIII.9
tensor espectral de potencia, XXIII.3
teorema
de desenmarañamiento, XI.31
óptico, XX.16, XX.17, XX.26
teoría
corrección general a la energía, XIV.21
de dos componentes, XXII.19
de perturbaciones, capítulos 14 y 17
de una partícula, XXII.18
semiclásica, XVII.31
Thomas y Fermi, modelo de, XVIII.5
Thomas-Reiche-Kuhn, regla de suma, IX.18, IX.19
tiempo
de retardo, VI.19
promedio de permanencia, VI.18
tierras raras, XVIII.13
Tillieu, J., XXI.22
Tonomura, A., IX.24
transformación
canónica de Bogolyubov, XIV.27
de Foldy y Wouthyusen, XXII.10, XXII.15
de Galileo, V.14, X.19
de norma, IX.7, IX.23, IX.24
y ecuación de continuidad, IX.23
lineal, XI.22
unitaria, IX.9, XIV.6, XXI.4, XXI.6
transición
amplitud de, XX.30
cuadrupolar eléctrica, XVII.15, XVII.16
reglas de selección, XVII.16
dipolar, XVIII.4
electrónica, XIX.5
estimulada, XVII.27
frecuencia de, XXII.8
periódica, XVII.10
probabilidad de, XVII.11–XVII.13, XVII.15, XVII.16, XVII.21–XVII.24, XVII.26, XVII.27
atómica dipolar, XVII.14
resonante, XVII.14
vibracional, XIX.8, XIX.9
transiciones espontáneas, XIII.21
transmisión, coeficiente de, VI.4, VI.5, VI.7, VI.10, VI.12, VI.13, VI.15, VI.16, VI.20, VII.1, VII.3, VII.10, VII.11, VII.14
para barrera de potencial, VI.13
para potencial de Hylleraas, VII.3
y vida media, VII.14
transmutación, XVIII.8
traza, X.5, X.6
propiedades, XXI.1

triplete, x.5, xii.28, xvi.10, xviii.10, xx.9, xx.29

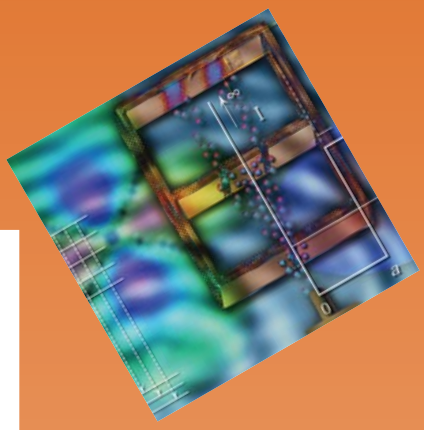
u.a.m., xxiv.1
Ungincius, P., xiii.27
unión Josephson, ix.24

vacío electromagnético, xxiii.1–xxiii.5, xxiii.11
valor medio, ii.6, iii.8, vi.17
valores medios, evolución, xiii.34
valores propios, v.eigenvalores
variable
  de centro de masa, xiv.20
  dinámica, elementos de matriz, xiv.2
  estocástica, xxiii.3
  relativa, xiv.20
variables
  canónicas conjugadas, x.3, x.14
  dinámicas y teoría de perturbaciones, xvii.26
  estocásticas, xxiii.12
  ignorables, iv.4–iv.6
variancia, v. dispersión, fluctuaciones
vector
  de estado, v. función de onda
  en el espacio de Hilbert, x.15
  longitud de un, x.15
velocidad
  de fase, iv.12, iv.13
  de flujo, v.6, v.9, v.10, v.16, vi.19
    en el interior de una barrera, vi.19
  de flujo incidente, vi.18
  de grupo, iv.13, v.11
  de tunelaje, vi.18
  estocástica, vi.19, xxiii.8
  local, xxiii.9
  local de flujo, vi.18, vi.19
  orbital, ii.3
  promedio, iv.8
  sistemática, xxiii.8, xxiii.10
vida media, xiii.22, xvii.27
  de los estados del átomo de hidró- geno, xiii.23
  y coeficiente de transmisión, vii.14
  y método WKB, vii.14
virial
  teorema del, viii.16, ix.12, xi.6, xiii.7, xiii.31, xv.14, xxi.11, xxiii.2, xxiii.7
    ensemble de osciladores, xxi.11
    generalización tensorial, ix.17
    generalizado, xiii.14
    para el oscilador armónico, xi.6
    sistema de varias partículas, ix.17
    y átomo hidrogenoide, xiii.7
Vizgin, V. P., xii.20

Waals van der
  energía de, xvii.9, xix.14
  fuerza de, xvii.9, xix.4, xix.14
Waerden van der, ecuación de, xxii.14
Weinberg, S., i.5
Wien, W., i.1
Wien
  constante de, i.3
  distribución de, i.1
  ley de, i.1
  ley de desplazamiento, i.3
Wiener y Khinchin, teorema de, xxiii.3
Wierl, xiv.12
Wigner
  distribución de, xxi.32, xxiii.6,
  funciones de, xii.42
Wilson y Sommerfeld, reglas de, i.12–i.15, i.20, v.13, xviii.5
  y método WKB, vii.2, vii.12
Wolf, E., xvii.31

Yndurain, F. J., xvii.20
Yukawa, potencial de, xvii.5
  y método variacional, xvii.5

Zeeman, efecto, xiv.5, xiv.24
  normal, xiv.5
zitterbewegung, xxii.11, xxii.18
  para partícula en un campo eléctrico, xxii.14
  para partícula en un campo magnético, xxii.12



Los autores de la presente obra nos dicen en su Prefacio: "En este volumen se discute con detalle la solución de cada uno de los problemas sugeridos al lector en el texto *Introducción a la mecánica cuántica*, de Luis de la Peña, a los que se han agregado otros para redondear su contenido. Durante la elaboración del volumen se ha tenido presente en todo momento que, mucho más importante que la mera solución de un ejercicio, es el valor didáctico que el proceso de su solución puede tener para fijar y mejorar la comprensión del tema en estudio.

"Este libro, tal como sucede con el texto que le sirve de base, está destinado en primer lugar a los estudiantes de nivel de licenciatura que desean adquirir un sólido conocimiento de los principios de la mecánica cuántica, particularmente estudiantes de las carreras de física y afines, como algunas de las ingenierías modernas o la química teórica. Sin embargo, el nivel se extiende de manera natural hasta cubrir varios temas más propios de los estudios de posgrado o de cursos especializados…; es el interés del propio alumno el que debe decidir hasta dónde avanza en cada ocasión. La organización del volumen es directa: en la primera sección de cada capítulo se resuelven todos y cada uno de los problemas propuestos en *Introducción a la mecánica cuántica*… Sigue en cada caso una segunda sección en que se resuelven y discuten de manera análoga los problemas adicionales… Finalmente, aparece la sección de ejercicios a resolver…; el nivel de estos ejercicios es normalmente introductorio."

Diseño de portada: Guadalupe Villa Ramírez

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FONDO DE CULTURA ECONÓMICA

9 789681 670351